

307.226

20
1972

^p
**MAGYAR
FIZIKAI FOLYÓIRAT**

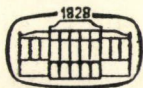
**A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI**

**KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR,
PÁL LÉNÁRD ÉS SZALAY SÁNDOR
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL**

**SZERKESZTI
JÁNOSSY LAJOS**

XX. KÖTET

1. FÜZET



**AKADÉMIAI KIADÓ
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
BUDAPEST 1972**

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: BUDAPEST V., ALKOTMÁNY UTCA 21. SZ.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A klaszszikus irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikkeket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10—10 dolgozat megjelenése után a folyóiratfüzetekről leválasztva, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóiratról évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 ív terjedelmében.

A kéziratok a következő címre küldendők:

Jánossy Lajos akadémikus
Budapest, XII., Konkoly Thege út
Központi Fizikai Kutató Intézet

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként 48 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, Budapest, V., Alkotmány utca 21. pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11 248. külföldi megrendelések a „Kultúra” Könyv- és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat, Budapest, I., Fő utca 32. (Pénzforgalmi jelzőszám: 218-10990) útján eszközölhetők.

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmi ismertetőt írjanak.
2. A levezetéseknek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közöljék. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázószöveget írjanak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.

SZENNYEZÉS KÖRÜLI TÖLTÉSSŰRŰSÉG OSZCILLÁCIÓ ASZIMPTOTIKUS VISELKEDÉSE RÉZ ALAPÚ HÍG ÖTVÖZETEKBE*

TOMPA KÁLMÁN

MTA, Központi Fizikai Kutató Intézet, Budapest

TARTALOM

	Oldal
I. Bevezetés	2
II. Az MMR módszer elvi alapjai	3
A) A mag elektrosztatikus kölcsönhatása környezetével	3
b) Kvadrupól kölcsönhatás	4
b) Kvadrupól perturbált MMR spektrum nagy mágneses térben	4
B) Mágneses kölcsönhatás	7
III. Szennyezés okozta perturbációk	9
A) Töltéssűrűség-oszcilláció nem-átmeneti fém szennyezések esetén	9
a) Izotróp modell. Friedel-féle összegszabály	9
b) A modell további kiterjesztése	10
B) Átmeneti fém szennyezés nem-átmeneti fém mátrixban	12
a) Töltéssűrűség-oszcilláció nem-mágneses virtuálisan kötött állapotban	14
b) Töltéssűrűség-oszcilláció lokalizált mágneses momentum esetén	15
C) Mérhető mennyiségek	15
a) A MMR spektrumból meghatározható mennyiségek	16
b) Szennyezési ellenállás	18
c) Szennyezések kölcsönhatása	19
D) Fáziseltolódások meghatározási módszerei	19
a) Elméleti módszerek	19
b) Félempirikus módszerek	20
IV. Irodalmi eredmények és következményeik	24
A) Irodalmi eredmények	24
a) Egyéb mérések	24
b) Kvadrupóleffektus-mérések	26
B) Irodalmi eredmények összefoglalása, következmények	28
a) Összefoglalás	28
b) Következtetések	28
c) A disszertáció konkrét célkitűzése	28
V. Mérés rugalmasan deformált kockatextúrás réz fólián	29
A) Irodalmi eredmények	29
B) Saját eredmények	30
a) A kísérlet és eredménye	30
b) Térgradiens a rugalmasan deformált köbös fémrácsban	30
c) A mérések kiértékelése	32

* Doktori értekezés. Megvédve 1971. november

VI. Mérési eredmények híg ötvözetekben	33
A) Modellanyagok	34
a) A modellanyagok kiválasztása	34
b) Anyagminták készítése és jellemzőik	34
B) Mérési eredmények	35
a) Három tipikus mérési eredmény	37
b) Nem-átmeneti fém szennyezést tartalmazó híg ötvözetek	37
c) Átmeneti fém szennyezést tartalmazó híg ötvözetek	42
VII. Értékelés, következtetések	46
A) Értékelési módszerek	47
a) All-or-nothing modell	48
b) Sagalyn és mtsai módszere	48
B) Mérési eredmények kiértékelése	50
a) Nem átmeneti fém szennyezést tartalmazó híg ötvözetek	51
b) Átmeneti fém szennyezést tartalmazó híg ötvözetek	51
c) Egy metallográfiai következmény	56
C) Összefoglalás, következtetések	56
VIII. Hogyan tovább? Új kísérletek	57
Függelék	59
Köszönetnyilvánítás	60
IRODALOM	60

Bevezetés

Vizsgálataink célja: rendezetlen réz alapú híg ötvözetek elektronszerkezetének a jobb megértése.

A vizsgálati módszer: a mátrixmagok mag mágneses rezonancia (MMR) spektroszkópiája (pontosabban a ^{63}Cu magok és a szennyezés hatására létrejövő nem köbös szimmetriájú környezet közti elsőrendű kvadrupól kölcsönhatás vizsgálata MMR módszerrel).

A mért fizikai mennyiség: az elektromos tér gradiense, illetve a térgradienssel arányos vezetési elektronsűrűség-oszcilláció a szennyezés körül.

A vizsgálatok célkitűzésével kapcsolatban a bevezetésben egyetlen kérdést vetünk fel:

A kapott információ a konkrét híg ötvözetekre vonatkozó adatokon túlmenően jelent-e valami mélyebb, általánosabb megismerést?

Igen, mert,

a) a tiszta fémekben (mátrix: M) a bevitt szennyezés (szennyezés X) hatására létrejövő perturbáció megismerése a perturbálatlan rendszer, tehát a fém elektronszerkezetének a jobb megértését is elősegíti;

b) triviális módon a híg ötvözetek elektronszerkezetének a felderítésére az első lépcsőt jelenti a megismerés a fémből az ötvözet felé vezető útján;

c) átmeneti fém szennyezést tartalmazó, nem mágneses mátrixú híg ötvözetek a mágneses fémek olyan megvalósítható modelljei, melyekben a „lokalizált momentum” születése, viselkedése és azok kölcsönhatása külön-külön tanulmányozható.

A rendezetlen híg ötvözetek fizikai tulajdonságainak a vizsgálata és így azok a felismerések is, amelyek alapján a felvetett kérdéseket megfogalmaztuk, a legutóbbi évek szilárdtestfizikai kutatásainak a legjobb eredményei közül valók. Annak ellenére, hogy egyre nő az idevágó publikációk száma, a szerteágazó kutatási területet a megoldatlan kérdések számának a növekedése jellemzi.

Figyelembe véve a korábbi években a tiszta rézen szerzett metallográfiai tapasztalatokat és a saját MMR spektroszkópiai gyakorlatunkat, a disszertáció modell-anyagok és kísérleti módszer által szükségszerűen leszűkített célkitűzését

az anomáliák teljes skáláját elérhető távolságban mutató (ugyanakkor iparilag is fontos) réz alapú híg ötvözetek kiválasztása alapján,

és ezekben az ötvözetekben korábban mások által nem vizsgált effektusnak, az MMR spektrum elsőrendű kvadrupól effektusának az adott területen való nagyszerű használhatóságát felismerve fogalmaztuk meg.

Az eddigi mérések modellanyagait úgy választottuk ki, hogy egy-egy anyag vizsgálata alapján az összefüggő kérdések egy-egy pontosabban megfogalmazható részletére lehetőség szerint egyértelmű választ kapjunk, különös figyelmet szentelve az átmeneti fém szennyezéseknek.

A disszertáció felépítését a tartalomjegyzék alapján nyomon követheti az olvasó, újrafelsorolásnak semmi értelme. Szükségesnek tartjuk azonban megemlíteni, hogy az első három fejezet, I...III. irodalmi eredményeket tartalmaz, tehát itt csak a célszerű csoportosítás a szerző munkája. A IV. fejezet a meglevő mérési eredmények kritikai összefoglalása és a célkitűzés konkrét megfogalmazása. Az V., VI. és VII. fejezetekben ismertetjük tulajdonképpen új eredményeinket. Szokatlan a disszertáció VIII. fejezete, amely részben — s ez az elvégzett mérések természetéből következik — irodalmi és részben saját mérési eredményeinken alapuló, konkrétan körvonalazható kutatási programot tartalmaz.

A bevezetésben a disszertáció célkitűzésének általános megfogalmazását adtuk meg. A kérdés matematikai formába öntése előtt a vizsgálati módszer elvi alapjait össze kell foglalni. Ezt tartalmazza a II. fejezet.

II. Az MMR módszer elvi alapjai

A fejezetben a mag és környezete közti elektromos kvadrupól kölcsönhatással, a kölcsönhatás egykristály és polikristályos minták MMR spektrumára gyakorolt hatásával foglalkozunk, és megemlítjük a köbös szerkezetű kristályban a rácshiba körüli helyfüggő (inhomogén) elektromos térgradiens MMR spektrum-módosító hatását.

A. A mag elektrosztatikus kölcsönhatása környezetével

Az elektrosztatikus kölcsönhatásból csak a magspin-orientációtól függő rész érdekes számunkra, pontosabban a mag nem gömbszimmetrikus elektromos töltéeloszlásából származó elektromos kvadrupól momentum (Q) és a magon kívüli töltésekből származó elektromos tér gradiense (q) közti kölcsönhatás [A, 1] [C, 3].

Az elmélet lényeges momentumai:

a mag alapállapotáról van szó, a pontszerű mag elektrosztatikus kölcsönhatása környezetével érdektelen számunkra;

a mag legalacsonyabb el nem tűnő elektromos multipólusa a kvadrupól momentum;
magasabb multipólusok hatását nem vesszük figyelembe; elektromos kvadrupól momentummal csak $I \geq 1$ spinű magok rendelkeznek.

a) *A kvadrupól kölcsönhatás*

A kvadrupól kölcsönhatás Hamilton-operátora (lásd pl.: [A, 1])

$$H_Q = \frac{1}{2} \sum_{j,k} \tilde{Q}_{jk} \cdot \tilde{V}_{jk}$$

\tilde{Q}_{jk} az elektromos kvadrupól momentum tenzor, \tilde{V}_{jk} a mag helyén vett elektromos térgradiens tenzor, definíció szerint annak -1 -szerese; mindkettő másodrendű szimmetrikus tenzor.

A Q_{jk} tenzorkomponensek a mag Q kvadrupól momentumával az I magspinnel és az I_j, I_k magspin komponens operátorokkal kifejezhetők; (Q definíciója pl.: [A, 1]-ban adott), azaz

$$Q_{jk} = \frac{eQ}{6I(2I-1)} \left\{ \frac{3}{2} (I_j I_k + I_k I_j) - \delta_{jk} (I+1) I \right\}.$$

A térgradiens komponensek száma is redukálható, a tenzor eredetileg öt független komponenssel rendelkezik, (mert másodrendű, szimmetrikus és $\Delta V=0$). $\Sigma^p(x', y', z')$ főtengelyrendszerben a független komponensek száma kettő:

$$eq \equiv V_{z'z'} \equiv \left(\frac{\partial^2 V}{\partial z'^2} \right)_0 : \text{térgradiens,}$$

$$\eta \equiv \frac{V_{x'x'} - V_{y'y'}}{V_{z'z'}} : \text{„aszimmetria paraméter”,}$$

feltéve, hogy $|V_{z'z'}| \geq |V_{y'y'}| \geq |V_{x'x'}|$ az aszimmetria paraméter értéke zéró és egy közé esik, hengersizmetria ($V_{y'y'} = V_{x'x'}$) esetén $\eta=0$; gömb- vagy köbös szimmetria esetén $q=0$. Természetesen a térgradiens jellemzéséhez q, η megadásán túlmenően a Σ^p rendszer kristályhoz viszonyított helyzetét is meg kell adni.

b) *Kvadrupól perturbált MMR spektrum nagy mágneses térben*

Nagy H_0 külső mágneses térben a $\gamma_m \hbar$ mágneses momentumú mag Zeeman-energiája $H_M = -\gamma_m \hbar H_0 I_z$ (*...). A $H_0 \parallel z$ -hez rögzített $\Sigma^{H_0}(x, y$ tetszőleges, $z \parallel H_0)$ laboratóriumi koordináta rendszerben H_M diagonális és $E_m^{(0)}$ sajátértékei:

$$E_m^{(0)} = -\gamma_m \hbar H_0 m, \quad m = -I, \dots, I$$

alakúak, tehát az energianívók ekvidisztánsak és az $m \rightarrow m-1$ átmenethez tartozó

* γ_m : a mag giromágneses faktora,
 \hbar : a 2π -vel osztott Planck-állandó.

relatív intenzitás $I(I+1)-m(m-1)$. Részletesen foglalkozunk azzal az esettel, amikor H_Q a H_M perturbációjaként kezelhető. A perturbált energianívók:

$$E_m = \sum_{k \geq 0} E_m^{(k)}$$

$E_m^{(k)}$ ($k \neq 0$) az $E_m^{(0)}$ mágneses nívó k -ad rendű perturbációja. A perturbációs számítással kapott eredmények:

$$E_m^{(1)} = \frac{1}{2} h \nu_Q f_0^H \left(m^2 - \frac{a}{3} \right),$$

$$E_m^{(2)} = -h \nu_Q^2 \frac{m}{12 \nu_0} \{ |f_1^H|^2 (8m^2 - 4a + 1) + |f_2^H|^2 (-2m^2 + 2a + 1) \}$$

a bevezetett rövidítések; $a = I \cdot (I+1)$, ν_0 a mag Larmor frekvenciája, $\nu_Q \equiv \equiv 3e^2 q Q / 2I(2I-1)h$, továbbá a Σ^{H_0} és a térgradiens tenzor főtengeleyrendszerét jellemző Σ^p rendszerek relatív helyzetét leíró f_i^H mennyiségek, melyek értékét $\eta=0$ tengelyszimmetrikus esetre adjuk meg

$$f_0^H = \frac{1}{2} (3 \cos^2 \theta - 1),$$

$$f_{\pm 1}^H = \sqrt{\frac{3}{2}} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i \varphi},$$

$$f_{\pm 2}^H = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{2}} \sin^2 \theta e^{\pm i 2 \varphi},$$

(e mennyiségek tulajdonképpen a térgradiens Σ^{H_0} -ban való megadásához szükségesek), θ és φ z' polárkoordinátái Σ^{H_0} -ban.

Az eredményekből az elsőrendű vonaleltolódás:

$$\nu_m^{(1)} = \frac{1}{2} \left(m - \frac{1}{2} \right) \nu_Q \cdot (3 \cos^2 \theta - 1), \quad (\text{II. 1})$$

és a centrális komponens másodrendű eltolódása:

$$\nu_{1/2}^{(2)} = -\frac{\nu_Q^2}{16 \nu_0} \cdot \left(a - \frac{3}{4} \right) (1 - \cos^2 \theta) (9 \cos^2 \theta - 1). \quad (\text{II. 2})$$

Talán nem érdektelen megemlíteni, hogy az $1/2 \rightarrow -1/2$ átmenet, a centrális komponens elsőrendben nem tolódik el, ezért szükséges ennél a másodrendig elmenni.

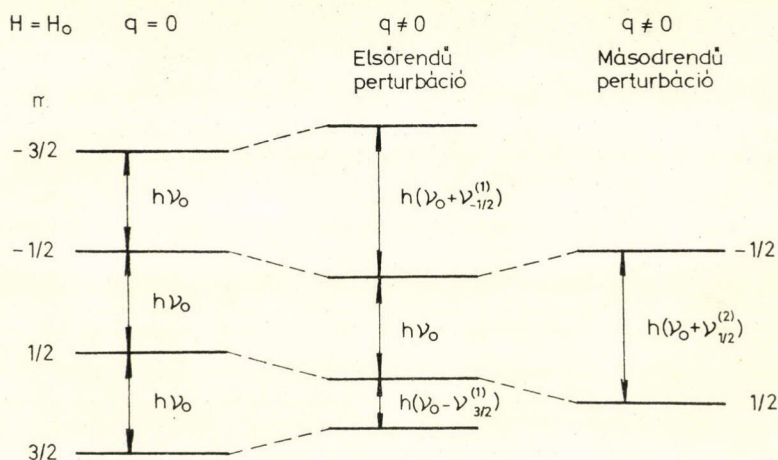
Az energianívókat és fiktív spektrumokat a II.A.b-1. ábrán tüntettük fel. $I = 3/2$ spinű atommagra H_0 külső mágneses térben, elsőrendű kvadrupól perturbációval és a centrális komponens másodrendű perturbációjával.

Megemlítjük, mert az egyik kísérleti összehasonlításnál szükségünk lesz rá, hogy „tisztá” kvadrupól rezonancia esetén ($H_0=0$) az $I = 3/2$ spinű mag egyetlen rezonancia-vonalának frekvenciája (szintén az idézett irodalomból)

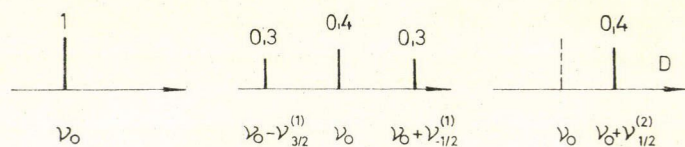
$$\nu_{3/2} = \frac{1}{2} \cdot \frac{e^2 q Q}{h} \equiv \nu_Q, \quad (\text{II. 3})$$

az eredmény szögfüggő tatot nem tartalmaz, hiszen z' a kvantálási tengely.

Nívók ; $I = 3/2$



Spektrum



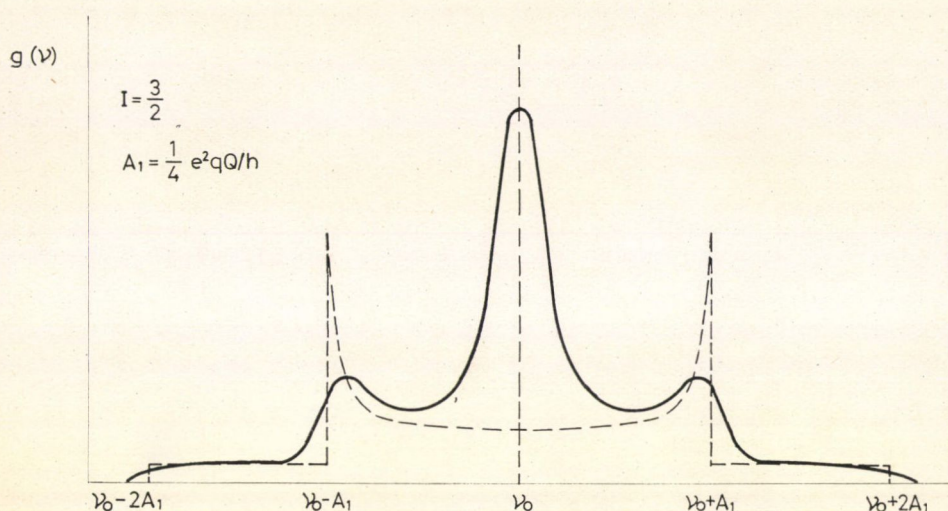
II.A.b.-1. ábra

$I=3/2$ spinű mag energianívói és MMR spektruma H térben, első és másodrendű kvadrupól perturbációval és anélkül

Minden összefüggésben a qQ szorzat fordul elő, tehát szilárdtestfizikai vizsgálatoknál ismernünk kell a mag jellemző adatait, Q -t [P, 1].

Egykristályokra a spektrum azonos az egy magra vonatkozó ismertetett eredményekkel, azzal a természetes módosítással, hogy a spektrum-vonalak nem élesek (δ -függvényszerűek) hanem pl.: a magok közti dipól-dipól kölcsönhatás következtében kiszélesednek, de a vonaleltolódásokat az ismertetett összefüggések (II. 1) és (II. 2) írják le.

Polikristályos mintákban $\Sigma^p \Sigma^{H_0}$ -ban minden lehetséges helyzetet egyforma valószínűséggel vesz fel, a spektrum alakja kiszámítható, a kapott spektrumok első és másodrendű perturbáció esetén a dipól-dipól kölcsönhatás figyelembevételével és anélkül a II.A.b.-2. és II.A.b.-3. ábrákon láthatók.



II.A.b.-2. ábra

$I=3/2$ spinű mag MMR spektruma elsőrendű kvadrupól perturbációt és dipól-dipól kölcsönhatást figyelembe véve, polikristályos mintára [B, 12]

Az elsőrendű spektrum frekvenciától (külső tértől és hőmérséklettől) független, a másodrendű spektrum a külső térrel fordítva arányos.

Az elmondottakhoz csupán egyetlen további hozzáfűzni valónk van. Kőbös fémekben a szennyezés körül kialakuló térgradiens helyfüggő, mátrix atommagtól—mátrix atommagig változik, az eredő spektrum a II.A.b.-2., illetve II.A.b.-3. ábrán bemutatott, az adott térgradiens előfordulási valószínűségével súlyozott spektrumok eredője. A kiértékelésnél a kérdésre még visszatérünk (VII. fejezet).

B. Mágneses kölcsönhatás

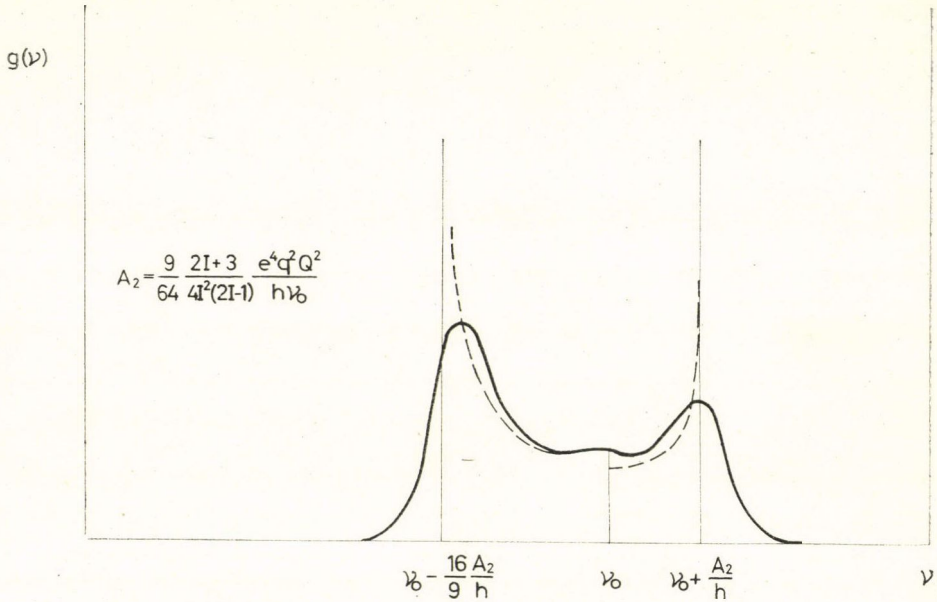
Az atommag és környezete között fellépő mágneses kölcsönhatásnak csupán egyetlen jellegzetességét kívánjuk megemlíteni; részleteit illetően az irodalomra utalunk [A, 1] [F, 1].

Híg ötvözetekben a szennyezésen fellépő elektronszórás hatására a mátrix mag helyén levő hiperfinom tér a tiszta fémekben levő atommagnál levőhöz viszonyítva megváltozik (ugyanakkor az atommagok dipól-dipól kölcsönhatásának [V, 4] változását nem vesszük figyelembe). A H_0 külső mágneses térbe helyezett $\gamma_m I \hbar$ mágneses momentumú (max. mérhető komponens) atommag Zeeman-energiáját és energia saját-

értékeit a II.A.b. pontban már idéztük. Eltekintve az atommagok közti dipól-dipól kölcsönhatástól a Zeeman-energia sajátértékei most is

$$E_m^{(0)} = -\gamma_m \hbar H_{\text{eff}} m$$

alakulnak; a H_{eff} tér a H_0 külső és a $\Delta H'$ elektronok által keltett térből tevődik össze, $H_{\text{eff}} = H_0 + \Delta H'$.



II.A.b.-3. ábra

$I=3/2$ spinű mag MMR spektrumának centrális komponense, másodrendű kvadrupól perturbációt és dipól-dipól kölcsönhatást figyelembe véve polikristályos mintára [B, 12]

$\Delta H'$ -ből leválasztva a fémekre jellemző, a vezetési elektronok Pauli-paramágnességéből származó, a tiszta fémre vonatkozó Knight-eltolódást, ami minden mátrix atommagra azonos, adódik a szennyezés keltette hiperfinom térváltozás ΔH , ami a szennyezéstől mért távolsággal változik és az MMR spektrum inhomogén kiszélesedését okozza. Az eredő spektrum természetesen, az így kapott és a magok közti dipól-dipól kölcsönhatásból származó (feltevésünk szerint a tiszta fémével azonos) spektrum szuperpozíciója, kvadrupól kölcsönhatás esetén természetesen mind a háromé.

Összefoglalva: a II. fejezet vázolja az MMR spektrum várható alakulását a szennyezés környezetében fellépő elektromos és mágneses effektusok hatására. A III. fejezetben a szennyezés keltette perturbációkat részletezzük.

III. A szennyezés okozta perturbációk

A fejezet a felvetett kérdés pontosabb, a rendelkezésre álló elméletek alapján megadható mennyiségi megfogalmazását tartalmazza nem-átmeneti és átmeneti fém szennyezések esetén. A töltéssűrűség-oszcilláción kívül felsoroljuk az azokra a fizikai mennyiségekre vonatkozó elméleti eredményeket is, melyekről valamilyen oknál fogva beszélnünk kell a disszertációban. A fejezetben foglaltak irodalmi eredmények, és így a II. fejezethez hasonlóan nem a minden részletre kiterjedő ismertetés, hanem a minél rövidebb összefoglalás a célunk.

A. Töltéssűrűség-oszcilláció nem-átmeneti fém szennyezések esetén

A nagyszámú eredeti irodalom felsorolása helyett két kézikönyvre hivatkozunk [K, 2] és [F, 4].

A szilárdtestfizikai soktest-módszerekkel (perturbációs elmélet [F, 3], dielektromos válaszelmélet [N, 3], további felsorolás [F, 4]-ben) végzett számítások híg ötvözet modellje a szabadelektron-gázba merülő pozitív ponttöltés. Az árnyékoló töltés — a dielektromos állandó $q = 2k_F$ -nél fellépő szingularitásának a következménye — a perturbáló töltéstől nagy távolságban $r^{-3} \cdot \cos 2k_F r$ alakú oszcilláció-függvénnyel írható le (k_F : Fermi-hullámszám).

Az eredmények közül külön kiemeljük a numerikus végeredményig elvitt, soktest perturbációs módszeren alapuló, már említett Langer—Vosko [L, 1]-féle eredményt, ugyanis híg ötvözeink közül a Cu—Zn híg ötvözet elég jól megközelíti a már említett modellt, és így az elméleti eredmény összehasonlítható a kísérlettel. A töltéssűrűség-oszcilláció

$$\Delta n(r) = 0,0236 \Delta Z \frac{\cos(2k_F r + \pi)}{r^3} \quad (\text{III. 1})$$

alakú (ΔZ : szennyezés-mátrix valenciakülönbség, r : ponttöltéstől mért távolság).

Ezek az elméletek matematikai eleganciájuk ellenére kevesebb betekintést engednek a jelenség fizikai alapjaiba, mint a független elektronokon és véges kiterjedésű szóró potenciál feltételezésen alapuló számítások.

a) Izotróp modell. Friedel-féle összesszabály

A független részecske modell alapján történő számolásnál első közelítésben alkalmazott feltételek: a szennyezés $V(r)$ gömbszimmetrikus potenciállal írható le, a vezetési elektronok pedig síkhullámok (a reális ionpotenciált gömbszimmetrikus pszeudopotenciállal helyettesítjük), a szennyezés maga körül rácsdeformációt nem kelt, a hígítás végtelen.

A szennyezésen történő vezetési elektron szórás a parciális hullámok módszerével számolható, a hullámegyenletet kielégítő, gömbre normált, stacioner szórt hullám a szennyezéstől r távolságban

$$\varphi_l(r) = \frac{1}{(2\pi r)^{1/2}} \sin \{kr + \eta_l(k)\}$$

alakú; $\eta_l(k)$ az 1 kvantumszámmal jellemzett, szórt hullám fáziseltolódása.

A szóródás következtében perturbált elektronok száma:

$$\Delta N = \frac{2}{\pi} \sum_l (2l+1) \eta_l(k_F) + \text{oszcilláló tag.}$$

A térben oszcilláló tag adja a vezetési elektron sűrűség hosszútávú oszcillációját, hatására még visszatérünk.

ΔZ mátrix-szennyezés valenciakülönbség esetén a $V(r)$ potenciál szelf-konzisztenciája biztosítja, hogy a ΔNe töltés éppen semlegesítse ΔZe -t, azaz a szennyezéspotenciál nagy távolságban teljesen le van árnyékolva. Az oszcilláló tag járuléka hosszú távon kiátlagolódik, így

$$\Delta Z = \frac{2}{\pi} \sum_l (2l+1) \eta_l(k_F), \quad (\text{III. 2})$$

az összefüggés a Friedel-féle összegszabály, fontos szelf-konzisztencia feltétel a potenciálra nézve.

Sok esetben nem szükséges a potenciál részleteit ismerni, elegendő az első néhány fáziseltolódás ismerete a Fermi-hullámszámnál; természetesen ki kell elégíteniük a Friedel-féle összegszabályt.

A vezetési elektron sűrűség szórás következtében fellépő hosszútávú oszcillációjának aszimptotikus alakja

$$\Delta n(r) = \frac{A}{r^3} \cos(2k_F r + \varphi),$$

$$A \sin \varphi = \frac{1}{2\pi^2} \sum_l (-1)^l (2l+1) \sin^2 \eta_l(k_F) \quad (\text{III. 3})$$

$$A \cos \varphi = \frac{1}{2\pi^2} \sum_l (-1)^l (2l+1) \sin \eta_l(k_F) \cos \eta_l(k_F)$$

A szennyezés hatására a vezetési elektronok úgy rendeződnek át, hogy a szennyezés többlettöltését teljesen leárnyékolják. Az árnyékoló töltés a vezetési sáv különböző szimmetriájú állapotaiból épül fel egészen a Fermi-energiáig. Amint látni fogjuk, a hosszútávú oszcilláció a szennyezések egymás közötti, mátrixmagokkal és mátrixatomokkal való indirekt kölcsönhatáshoz vezet. Az árnyékoló töltéssűrűség a szennyezés helyén véges, ellentétben a Thomas—Fermi-árnyékolásból kapott töltéssűrűséggel.

Kohn és Vosko [K, 4] meghatározták a töltéssűrűség-oszcillációt Bloch-elektronképben is, az eredményt (2.17) formulájuk tartalmazza, következményére a térgadiens felírásánál (III. C. fej.) visszatérünk. (Egyébként a hullámfüggvény periodikus részének négyzetével való szorzást jelent a töltéssűrűség-oszcillációban.)

b) A modell további kiterjesztése

A b) pont a realisabb modellek irányában tett lépéseket: a szennyezés körüli rácsdeformáció beépítését és elmélet néhány továbbfejlesztett formáját, a töltéssűrűség-oszcilláció preaszimptotikus alakját, a nem gömbszimmetrikus Fermi-felület, az elektron-degeneráció következményeit, külső paramétereiktől (mágneses tér, hőmérséklet) való függését tartalmazza.

1. Szennyezés körüli rácsdeformáció. Beal Monod—Kohn-elmélet

A szennyezés okozta rácsdeformáció hatásának első, a szilárdtestek kontinuummodelljén alapuló figyelembe vétele Blatt [B, 11] nevéhez fűződik, aki a réz és ezüst alapú híg ötvözetek szennyezési ellenállásának a szennyezés periódusos rendszerben elfoglalt helyétől való függését kívánta értelmezni. A fizikai kép világos: a szennyezés körül a deformáció (tágulás vagy zsugorodás) hatására megváltozik az elektronsűrűség, így a szennyezési cellára eső elektronsűrűség, tehát a leárnýékolandó töltés is. A módosított Friedel-féle összecsabály (III.2.) az alábbi:

$$\Delta Z' = \Delta Z - \frac{3}{\gamma_E} \frac{\delta_a}{a} Z_0, \quad (\text{III. 4})$$

ahol $\gamma_E = 3(1-\sigma)/(1+\sigma)$; σ : Poisson-viszony, $\delta_{a/a}$ a rácsállandó viszonylagos egységnyi szennyezés-koncentrációra eső változása, Z_0 a mátrixionok töltése.

Itt említjük meg először a szennyezés körül r^{-3} hatvány szerint változó deformációs tér figyelembevételének szükségességét. Tekintettel arra, hogy Sagalyn [S, 1] és mtsai csak a térgradiensre gyakorolt hatását számolták, konkrét eredményüket a III. C. a. pontban adjuk meg.

Mindkét effektus (tehát a Blatt- és a Sagalyn-féle) a szennyezés környezetében eltolódott mátrixatomokon való elektronszórás következménye, amint Beal Monod—Kohn [B, 2] elméletükben — amely a deformáció figyelembevételének egységes elmélete — bebizonyítják. „Random-phase” közelítésben számolják az elektrosztatikus potenciálnak egyetlen mátrixatom elmozdulására bekövetkező megváltozását, majd összegeznek az összes mátrixatomra. Feltételezik, hogy a centrális szennyezésen és az eltolódott mátrixatomokon való szórás additív. Az elmélet néhány következménye:

a mátrixatomok eltolódása következtében fellépő potenciálváltozás $\lambda = \pi/k_F$ amplitúdóval oszcillál és $\lambda \simeq d$ (rácsállandó), a kontinuummodell csak $\lambda \gg d$ határesetben igaz (Blatt-korrektció); amikor a Fermi-felület közel kerül a zónahatárhoz, a szórt hullámok interferenciája lép fel, ami anizotróppá teszi az effektust, lapcentrált köbös fémekben a töltéssűrűség-oszcilláció amplitúdója az $\langle 111 \rangle$ irányban maximális.

Az eltolódott mátrixatomokon a magasabb impulzusmomentumú ($l \sim 2$) elektronok szóródása is jelentős.

Ami a konkrét eredményeket illeti, a szerzők által kiszámolt elektromos térgradiensre és szennyezési ellenállásra vonatkozó összefüggéseket a III. C. a. és III. C. c. pontokban adjuk meg.

Az elmélet egy kifogásolható részletkérdése, hogy az aszimptotikus potenciálból első szomszédokra vonatkozó térgradienst is számolnak a szerzők.

2. Néhány további elméleti eredmény

A 2. pontban felsorolt elméleti eredményeket nem használjuk fel kísérleti eredményeink kiértékelésénél, helyenként (pl. a másodrendű kvadrupól effektus és pre-aszimptotikus formula közti reláció vonatkozásában) utalunk rájuk, de a felsorolással igazi célunk gondolkodásunk alapjainak a kiszélesítése.

A töltéssűrűség-oszcilláció *preaszimptotikus* alakja [A, 4] a jólismert Friedel-oszcilláció mellett még egy r^{-4} -es tagot is tartalmaz, azaz

$$\delta n(r) = Ar^{-3} \cos(2k_F r + \varphi) + Br^{-4} \cos(2k_F r + \zeta) \quad (\text{III. 5})$$

B és ζ definíciója [A, 4]-ben (4 formula) adott, a fáziseltolódásokat és a fáziseltolódások hullámszám szerinti deriváltjainak k_F -nél vett értékét tartalmazó összegek formájában. A szerzők becslése szerint $B \gg A$, úgyhogy a közeli szomszédoknál az r^{-4} tag hatását indokolt figyelembe venni.

A *mágneses tér* Friedel-oszcillációt módosító hatásával többek között *Rensink* [R, 2] és *Glasser* [G, 3] foglalkozott ponttöltés-szennyezés + szabadelektron-gáz modellben. Eredményük alapján detektálható effektus a rendelkezésre álló mágneses terekkel csak félfémekben várható. A Friedel-féle oszcilláció a dielektromos állandó $q = 2k_F$ -nél fellépő szingularitásának a következménye, tehát exakt módon csak teljesen degenerált elektrongáz ($T = 0^\circ\text{K}$) esetében igaz. A *hőmérséklet* Fermi-felületet elkenő hatásának figyelembevételére vonatkozó Kohn és Vosko becslés sokat idézett dolgozatában fordul először elő, ha Δk a Fermi-nívó szélessége, akkor az oszcillációs amplitúdó $e^{-(\Delta k)r}$ -rel csökken. Az *elektron-degeneráció* fokának a figyelembevétele *Alfred* és *Van Ostenburg* [A, 5] nevéhez fűződik. A modell ismét a ponttöltés-szennyezés tetszőlegesen degenerált, nem kölcsönható szabadelektron-gázban. Az eredmények szerint az árnyékoló töltés Friedel-oszcilláció formája csak korlátozott hőmérséklet és távolság, $r \sim \infty$ tartományban igaz egyébként az árnyékolás formája lényegesen bonyolultabb. A hőmérséklet okozta effektusok 1000°K alatt nem lényegesek, és a teljesen degenerált elektrongázra vonatkozó eredmény első két tagja a már korábban felírt *Alfred—Van Ostenburg* [A, 4]-féle eredménnyel azonos.

A *Fermi-felület anizotrópiájának* a számításba vétele tudomásunk szerint egyetlen reális Fermi-felületre sem történt meg. A felületmodellekre (síklapokkal, hengerpalástokkal határolt metszetekre) számolt Friedel-oszcilláció [R, 8] erős anizotrópiát mutat, lényeges eltérést az r hatványkitevőiben.

A *merev sávmodell* [W, 2] alapján a szennyezés hatására megváltozik az egy atomi cellára eső vezetési elektronszám, ami a mátrix Fermi-szintjének az eltolódását vonja maga után. Az egyszerű árnyékolási modell a Fermi-nívó eltolódását nem veszi figyelembe. Feltételezésünk szerint a Fermi-felület eltolódása a híg ötvözetben a tiszta fémhez viszonyítva a töltéssűrűség-oszcillációban nem okoz a többi elhanyagoláshoz képest nagyobb hibát.

Összefoglalva az elmondottakat: a szennyezés körüli töltéssűrűség-perturbáció leírására a Friedel-oszcilláció első közelítésének tekinthető; mindenesetre jobb az aszimptotikust jobban megközelítő elsőrendű kvadrupól effektus tartományában, mint a másodrendűben. Nem szabad azonban elfelejtenünk, hogy az egyszerű kép nagyon sok elhanyagolásra épül, és az említett jelenségek kvantitatív figyelembevétele — természetesen az erre vonatkozó elméleti eredmények megszületése után — egy jobb kiértékelésben elengedhetetlen.

B. Átmeneti fém szennyezés nem-átmeneti fémmátrixban

Ha a fémes mátrixba átmeneti fém szennyezést viszünk be, a szennyezésen lokalizált, virtuálisan kötött nívók jönnek létre [F, 4]; a virtuálisan kötött nívó a rezonancia-jelenség olyan esete, amikor két hasonló frekvenciájú, illetve saját energiájú rendszer hat egymásra; ebben a konkrét esetben a szennyezés d állapotairól és a

fémes mátrix vezetési sávjáról van szó. A két rendszer egymásrahatása következtében az eredetileg keskeny (atomi) d nívók kiszélesednek, az elektronok ebben az állapotban töltött átlagos élettartama véges lesz, kialakul a virtuálisan kötött nívó megnövekedett állapotsűrűséggel és a reális térben a szennyezésen lokalizálva.

A nívó matematikai leírása *Friedel* és munkatársai, (lásd pl. [D, 5]), illetve *Anderson* és *Wolff* [A, 6], [W, 1] nevéhez fűződik, az utóbbiak leírása alkotja a Suhl-féle spinfluktuációs modell [S, 6] alapját is, az első pedig az előző pontban tárgyalt szórási kép továbbvitele a nem átmeneti fémmátrix—átmeneti fém szennyezés esetére is. A két modell ekvivalenciáját számos esetben bebizonyították. A virtuális nívó alapján a *Friedel*—*Anderson*-modellben elvileg meghatározható a mágneses momentum megjelenésének a feltétele, ami

$$UN(d) > 1$$

alakban adható meg (ahol U az ellentétes spinű elektronok közti Coulomb-taszítás a szennyezésen, $N(d)$ a virtuális nívó állapotsűrűsége a Fermi-nívónál). A *Friedel*—*Anderson*-modell *Hartree*—*Fock*-közelítésben éles átmenetet ad a mágneses és nem mágneses állapot között, ami kísérletileg nem figyelhető meg (p.: [C, 1], [N, 2]).

A lokalizált momentummal rendelkező szennyezés fizikai mennyiségekre való hatásának leírása az s — d kicserélődési modell alapján történt [K, 5], amelynek az a feltételezés az alapja, hogy a szennyezésben fellépő lokalizált momentum és annak vezetési elektronokkal való kicserélődési kölcsönhatása külön kezelendő problémák. (Kondo feltételezi a lokalizált momentum létezését.) Az S spinű lokalizált momentumot a σ spinű vezetési elektronnal a JS . σ antiferromágneses kicserélődési kölcsönhatás kapcsolja össze (ami az ellenállás jól ismert Kondo-anomáliájához vezet).

Különböző szerzők — *Anderson*, *Schrieffer* és *Mattis*, *Yoshida* [A, 7], [S, 4] [Y, 1] — megmutatták, hogy a Kondo-effektus alacsony hőmérsékleten arra vezet, hogy a lokalizált momentumot teljesen kompenzálják a szennyezés környezetében polarizált vezetési elektronmomentumok. A vezetési elektronfelhő létrejötte kollektív hatás, a kristály minden egyes elektronja résztvesz az árnyékolásban: hullámfüggvénye úgy torzul a szennyezés környezetében, hogy járulékot ad a kompenzáló elektronfelhőhöz, és a lokalizált momentum + kompenzáló felhő ad zéró eredő mágneses momentumot. A nem mágneses — mágneses állapot közti átmenet hőmérséklete a Kondo-hőmérséklet, $T_k = T_F \exp \{-1/JN(d)\}$ T_F Fermi-hőmérséklet, J eff-csatolási állandó. Az effektus így egyáltalán nem alacsonyhőmérsékleti jelenség, hanem széles hőmérséklettartományban bárhol előfordulhat, és az elképzelés szerint lánc a mágneses és nem mágneses állapot között [S, 3], [D, 3]. A kísérletileg meghatározott J_{eff} kicserélődési állandók sokkal nagyobbak az elméletileg várhatóknál; a modell (s — d kicserélődés) zéró töltéssűrűség-oszcillációt ad [F, 3], a kísérletekkel ellentétben [L, 3], [T, 7], továbbá ma már triviális az, hogy a spinkompenzáció problémája nem kezelhető külön a lokalizált momentum keletkezésétől.

Az *Anderson*-modell *Hartree*—*Fock*-típusú megoldásában fellépő éles határvonal a dinamikus effektusok figyelembevételével nagymértékben eltávolítható [S, 6], [R, 8], [R, 9]. Ebben a közelítésben a lokalizált momentumot egészen általánosan úgy tekintik, mint egy lokalizált spinfluktuációt (LSF), amelynek élettartama $[1 - UN(d)]^{-1}$ -el arányos (ahol U az ellentétes spinű elektronok közti Coulomb-taszítás a szennyezésen, $N(d)$ a virtuális nívó állapotsűrűsége a Fermi-nívónál).

A nem mágneses — mágneses átmenet fokozatos, amint a fluktuációk élettartama nő; mágneses határesetben — ami végtelen élettartamnak felel meg — a spinfluktuáció klasszikus momentumként viselkedik. Ebben a képben tehát nincs szó sztatikus spinkompenzációról, hanem a többszörösen szóródó vezetési elektronok és szennyező potenciál kialakította dinamikus képről.

A modell a fizikai mennyiségek hasonló anomáliáit mutatja, mint a spinkompenzált állapot, de lassú átmenetet és nem minőségi különbséget ad a mágneses és nem mágneses üzemmód között, amit a szennyezésen mért magspin rács relaxációs időmérések is bizonyítanak [N, 2].

A továbbiakban a mágneses, illetve nem mágneses osztályozás kísérleti szempontból azt jelenti, hogy a kérdéses ötvözet az adott hőmérséklettartományban rendelkezik-e Curie—Weiss-típusú, $(T+T_k)^{-1}$ függést mutató szuszeptibilitással; gondolkodásunk szempontjából pedig azt a modellt jelenti (a LSF-elmélet szerint akkor a „mágneses rezsimben levő”, ill. „nem mágneses rezsimben levő” terminológia a megfelelő), amelyek a legjobban írja le a kérdéses ötvözetet az adott hőmérsékleten.

A kérdés tisztázásához a kísérleti fizikus mérési adatokat és meglevő elméleti modellel történő összehasonlítást tud nyújtani, nem törekedve természetesen arra, hogy eredményei mindenáron egyezzenek az éppen rendelkezésre álló elméleti formulával.

A továbbiakban külön tárgyaljuk a nem mágneses, ill. mágneses szennyezés keltette töltéssűrűség-oszcillációt, megadva, hogy melyik elméletből származott.

a) Töltéssűrűség-oszcilláció nem mágneses, virtuálisan kötött állapotban

A nem mágneses viselkedéshez vezető virtuálisan kötött nívó modellje [F, 4], [D, 5] spinben degenerált, a spin-fel és spin-le nívók helyzete azonos, a fáziseltolódások, és az általuk meghatározott mennyiségek spiniránytól függetlenek, éppen úgy, mint egyszerű potenciálszórás esetén. Várható az, hogy az $l=2$ kvantumszámmal jellemzett nívón a vezetési elektronok rezonanciaszórása lép fel, az $l=2$, d -szórás lesz a domináló, ennek megfelelően a Friedel-féle összszabályból

$$\eta_2(F_F) = \frac{N\pi}{10}$$

adódik, ahol N a részben betöltött virtuális d nívón levő elektronok száma, amely egyenlő a szennyezést árnyékoló vezetési elektronok számával. A töltéssűrűség-oszcilláció (III.3) kifejezésből az $l=2$ -es tagot tartva meg:

$$\Delta n(r) = \frac{1}{2\pi^2} 5 \sin\left(\frac{N\pi}{10}\right) r^{-3} \cos\left(2k_F r + \frac{N\pi}{10}\right), \quad (\text{III. 6})$$

a fáziseltolódás konkrét értéke a Friedel-féle összszabály következménye.

Az Anderson-modellből kiindulva, *Daniel* és *Friedel* [D, 5] és *Klein* és *Heeger* [K, 3] eredményeit felhasználva *Brettell* és *Heeger* [B, 13] kiszámolta a $\Delta n(r)$ -et és a (III.6) kifejezéshez jutott, nem mágneses esetben ezzel is bizonyítva az Anderson- és Friedel-kép ekvivalenciáját.

A szórás domináns jellegét a virtuális nívó-Fermi-nívó relatív helyzete határozza meg, távoli nívópárra az árnyékoló töltés a vezetési sáv s ; p , ... szimmetriájú részei-

ből épül fel, és a teljes formulával kell dolgoznunk. Természetesen szükség szerint figyelembe kell venni az eltolódott mátrixatomokon való szórást is (pl.: $5d$ átm. szennyezés).

b) *Töltéssűrűség-oszcilláció lokalizált mágneses momentum esetén*

Fizikai oldalról plauzibilisnek tűnik, hogy $T > T_k$ hőmérsékleten a lokalizált momentum spinfüggő potenciált képvisel és így a szórás összes jellemzője spinfüggő lesz, a Friedel-féle összegszabály (lásd pl.: [B, 7])

$$Z = \frac{1}{\pi} \sum_{l, \sigma} (2l+1) \eta_l^\sigma(E_F), \quad (\text{III. 7})$$

az elektronsűrűség-oszcilláció a spin-le: \downarrow és spin-fel: \uparrow elektronokra, csak az $l=2$ rezonáns tagot tartva meg [B, 7], [B, 6]

$$\Delta n^\sigma(r) = -\frac{5}{4\pi^2} \sin \eta_2^\sigma r^3 \cos(2k_F r + \eta_2^\sigma) \quad (\text{III. 8})$$

ami természetesen szintén aszimptotikus eredmény, és az $l=2$ rezonanciaszórásból származik.

Az oszcillációnak két következménye van, a

$$\Delta n(r) = \Delta n^\uparrow(r) + \Delta n^\downarrow(r) \quad (\text{III. 9})$$

töltéssűrűség-, és a

$$\Delta s(r) = \Delta n^\uparrow(r) - \Delta n^\downarrow(r) \quad (\text{III. 10})$$

spinsűrűség-oszcilláció.

Az utóbbi a mátrixmagok helyén hiperfinom teret keltve okozza a MMR jel sokak által vizsgált [O, 3], [O, 4], [B, 4], [C, 2], [S, 12], [S, 13], [V, 1], [V, 2], [V, 3] [Y, 2] H/T függő kiszélesedését.

Az $s-d$ modellből elsőrendű közelítésben számolt $\Delta n^\uparrow(r)$ és $\Delta n^\downarrow(r)$ azonos nagyságú de ellenkező előjelű [F, 3], így $\Delta n(r)=0$ a kísérletekkel ellentétben [M, 1], [L, 3], [T, 7].

Összefoglalva a III. B. pont eredményeit: az aszimptotikus tartományban formailag hasonló töltéssűrűség-formulák állnak rendelkezésünkre, mint nem átmeneti fémszennyezés esetén, eltérő fáziseltolódásokkal és tagszámmal. A következő fejezetben felsoroljuk azokat a számunkra szükséges összefüggéseket, amelyek a mérhető fizikai mennyiségeket írják le, majd ismertetjük a fáziseltolódások meghatározásának a módszerét.

C. Mérhető mennyiségek

Felsoroljuk azokat a vázolt elméletek alapján kiszámolt formulákat, amelyekre valamilyen oknál fogva szükségünk lesz; elsősorban és főként természetesen a töltéssűrűség-oszcilláció keltette elektromos térgradienssel foglalkozunk, másodsorban azokat a mennyiségeket említjük meg, melyekben a fáziseltolódások meghatározása más mérésekkel való közvetett összehasonlításhoz vagy egyes jelenségek megértéséhez utalásszerűen szükségesek.

a) Az MMR spektrumból meghatározható mennyiségek

1. Elektromos térgradiens

A térgradiens az MMR spektrumon csak a modern módszerek (lásd VIII. fej.) alkalmazása esetén mérhető közvetlenül: a fő rezonanciavonal MMR vizsgálata esetén a spektrumból kell meghatározni, ennek egyik legelterjedtebb formája, amikor a meghatározás derivált jel csúcstól csúcsig mért amplitúdójából történik; ezt alkalmaztuk mi is, és a VII. fejezetben a kiértékelési módszereknél ismertetjük.

A másik lehetőség: a meghatározás az abszorpciós jel második momentumából [V, 4] történik, feltéve, hogy a dipól-dipól és a kvadrupól járulékok összeadódnak [A, 1]. Ez utóbbi módszer hibája, hogy a második momentum híg ötvözetek esetén nem jól definiált (Lorentz-jellegű jel), ezért csak a második momentum lineáris koncentrációfüggését mértük a homogén szilárd oldal független bizonyítékeként, de a momentumból térgradienst nem határoztunk meg.

Ezek után visszatérve az elektromos tér gradiensére (röviden: térgradiens) egészen híg ötvözetekben az aszimptotikus tartományban feltesszük, hogy a lényeges térgradiens-járulék egyetlen szennyezéstől származik (végtelen hígítás), ami pontoszerűnek tekinthető, így az általa keltett térgradiens hengerszimmetrikus, jellemzője $eq \equiv -\partial^2 V / \partial z^2$ és származtatása a töltéssűrűség-oszcilláció keltette potenciálból történik.

Kohn—Vosko [K, 4] és Blandin—Friedel [B, 8] eredménye szerint, figyelembe véve a vezetési elektronok Bloch-jellegét, a térgradienst

$$q(r) = \frac{8\pi}{3} \alpha \Delta n(r) \quad (\text{III. 11})$$

alakú összefüggés csatolja a töltéssűrűség-oszcillációhoz. A Kohn—Vosko (2,30) formulájával definiált α -mennyiség az elektron-hullámfüggvény periodikus részének a négyzetét és a Steinheimer [S, 11]-féle $(1-\gamma_\infty)$ antishielding faktort tartalmazza. Tulajdonképpen a szabad-elektron-gázba merülő csupasz atommag és a Bloch-elektronokkal körülvett fémionon belüli atommag által érzett térgradiens hányadosa. Kohn és Vosko számítása szerint rézre vonatkozó értéke $\alpha=25,6$ és az eredmény kettes faktoron belül jó (mért értéke nem ismeretes). A (III. 11) formula független a szóró centrumtól, tehát minden típusú szennyezésünk esetén használható.

A Sagalyn és mtsai [S, 1] által számolt, a rácsdeformációból származó térgradiens (elterjedt nevén „méreteffektus”)

$$q_\lambda = \lambda \frac{27}{2^{3/2} \pi \gamma_E} \frac{1}{a} \frac{da}{a} r^{-3} \quad (\text{III. 12})$$

ahol $\gamma_E = 3(1-\sigma)/(1+\sigma)$; σ : Poisson-szám, a : rácsállandó, c : szennyezéskoncentráció, λ : a fém árnyékolás nélküli pontion-modellje alapján számolt (az első szomszédokra összegezve adódik a számfaktor) és a tényleges térgradiens hányadosát leíró empirikus paraméter. Feltevésük szerint a két térgradiens q és q_λ (III. 11) és (III. 12) összeadódik. A problémával itt tovább nem foglalkozunk, tisztázásának szenteljük a teljes V. fejezetet.

Beal Monod és Kohn [B, 2] elmélete szerint a térgradiens két járulékból, a szennyezés keltette, (III. 11) formulával leírt és az eltolt mátrixatomokon szóródó elektronok

miatt fellépő töltéssűrűség-oszcillációból származó (q_m) térgradiensből áll. A q_m további két tagra bontható: minthogy a formulák aszimptotikusak, tehát a szennyezéstől távol levő rezonáns mag helyén a hozzá közeli eltolt mátrixmagok által keltett térgradiensre, amely a Sagalynéhoz hasonló (III. 12) formulával írható le (részletesen nem számolják ki a szerzők), de látható, hogy a formulában α jelenne meg λ helyett (!), és a szennyezéshez közeli eltolt mátrixatomok által keltett térgradiensre. Ez utóbbi

$$q_m = 4k_F^2 \alpha \alpha_0 g_0 r^3 \cos(2k_F + \varphi) \cdot s(\bar{\epsilon}, 2k_F) \quad (\text{III. 13})$$

alakú és a használt jelölések

$$\alpha_0 = \frac{3}{4\gamma_E} \frac{da}{a} v_0; \quad v_0\text{-atomtérfogat a tiszta fémben,}$$

$$g_0 = \frac{1}{\pi k_F} \left(\left\{ \sum_l (2l+1) [-\sin \delta_l \cos(\delta_l - l\pi)] \right\}^2 + \left\{ \sum_l (2l+1) [-\sin \delta_l \sin(\delta_l - l\pi)] \right\}^2 \right)^{1/2}$$

$$\varphi = \arctg \frac{\sum_l (2l+1) \sin \delta_l \sin(\delta_l - l\pi)}{\sum_l (2l+1) \sin \delta_l \cos(\delta_l - l\pi)}$$

$\epsilon = \bar{r}/r$ és $S(\bar{\epsilon}, 2k_F)$ pedig lapcentrált köbös rácsra tabellázva van az idézett munkában. A járulék anizotróp S miatt, és a da/a rácsállandó-változáson keresztül függ csak a szennyezéstől, egyébként teljesen a mátrix tulajdonságai határozzák meg, a δ_l fáziseltolódások a rézionon szórt parciális hullámok fáziseltolódásai.

Cu—Ge-ra ($da/a = 0,092$) végzett számítások szerint nagy járulékot csak az $\langle 111 \rangle$ irányokba eső rezonáns magokra ad, kis rácsdeformáció esetén egyébként az így számolt járulék az első öt szomszédra kisebb, mint a Blatt-korrekcióból számolható járulék 1%-a. Így izotróp krisztallit-orientációjú mintáink eredményeinek kiértékelésekor első rendben nem vesszük figyelembe. (Az anizotrópia kimutathatóságára visszatérünk a VIII. fej.-ben.)

2. Knight-eltolódás

Az MMR spektrumból meghatározható a magok helyén levő hiperfinom tér, vagy elterjedt néven a Knight-eltolódás, ami híg ötvözetekben szintén inhomogén (mint az elektromos térgradiens) és a vonal kiszélesedését eredményezi; folyékony ötvözetekben kiátlagolódik és a rezonanciagörbe eltolódását idézi elő [Z, 2], [M, 4], [T, 2], [O, 1], [G, 1]. Nem kívánunk az olvadékok fizikájával is foglalkozni, a felsorolt irodalom betekintést ad a kérdéskörbe; viszont az ismertett szórás képen alapuló összefüggések alapján a használt fáziseltolódások helyességének bizonyítását szolgáló mérhető fizikai mennyiségek kis száma eggyel bővíthető az olvadékok Knight-eltolódásával.

A hiperfinom tér eredetére nézve kétféle lehet: származhat a már ismertett töltéssűrűség-oszcillációból, elmélete szilárd testekben Blandin és Daniel [B, 9], [B, 10], [D, 2] munkája, rézalapú nem mágneses szennyezést tartalmazó híg ötvözetek szilárd fázisában a kvadrupól effektus mellett elhanyagolható (az Ag alapú híg ötvözet játszik szerepet [R, 7]), ezért vagyunk kénytelenek az op. feletti híg ötvözetek eredmé-

nyeit idézni, a megfelelő elméletet és Cu alapú ötvözetek mérési eredményeit Odle és Flynn már idézett munkája [O, 1] tartalmazza:

$$-\frac{1}{k} \cdot \frac{\partial_k}{\partial_c} = \sum_l \{A_l \sin^2 \eta_l + B_l \sin 2\eta_l\}, \quad (\text{III. 14.a})$$

az (A_l, B_l) amplitúdón csak a mátrix tulajdonságaitól függenek, értékük [O, 1]-ben táblázatban megtalálható.

Lokalizált momentum esetén lép fel a hiperfinom tér *spinsűrűség*-oszcillációból származó változata, amelyik szilárd fázisban [B, 6], [B, 7]

$$\Delta H(r) = \frac{16\pi}{3} \mu_B \langle |\psi(0)|^2 \rangle \frac{\langle S_z \rangle}{S} \Delta s(r), \quad (\text{III. 14.b})$$

ahol $(\psi(0))$: Fermi-energiájú elektron hullámfüggvénye a rezonáns magnál a tiszta fémbe, σ_B : Bohr-magneton, $\langle S_z \rangle = \frac{2\mu_B S 2H_0}{3k_B T}$ termikus átlag, S : spin kvantumszám, H_0 : külső tér, k_B : Boltzmann-állandó, T : hőmérséklet és $\Delta s(r)$: spinsűrűség-oszcilláció ((III. 10)-formula). H_0/T függő kiszélesedést okoz, folyékony híg ötvözetekben pedig a vonal H_0/T függő eltolódását okozza [G, 1]. Az effektus részletes vizsgálata kitűzött feladatunk határán kívül esik, részben egy mért effektus kvalitatív magyarázata, részben összehasonlítás kedvéért kellett megemlítenünk. Mágneses híg ötvözetekben a kvadrupól effektussal együtt jelentkezik, szétválasztásuk külön gondot okoz.

b) Szennyezési ellenállás

A szennyezésen szórt elektronok hatáskeresztmetszetének ($\sigma^{(0)}$) ismeretében a szennyezési ellenállás (pl. [K, 4]),

$$\Delta \varrho = \frac{\hbar k_F c}{e^2} \sigma^{(0)}; \quad \sigma^{(0)} = \frac{4\pi}{k_F^2} \sum_{l=1}^{\infty} l \sin^2(\eta_{l-1} - \eta_l) \quad (\text{III. 15})$$

a fáziseltolódások ismeretében kiszámolható.

Ha az eltolt mátrixatomokon való szórás is figyelembe kívánjuk venni (úgy, ahogyan a térgradiensnél tettük), akkor *Beal Monod és Kohn* [B, 2] elmélete alapján a teljes szórási keresztmetszet

$$\sigma = \sigma^{(0)} + \sigma^{(1)} + \Delta \sigma \quad (\text{III. 16})$$

lesz, ahol $\sigma^{(0)}$ az előbbi — a centrális szennyezésen történt — szórás hatáskeresztmetszete, $\sigma^{(1)}$ az eltolt mátrixatomokon bekövetkezett szórás hatáskeresztmetszete, $\Delta \sigma$ pedig interferencia-tag. Az utóbbi kettő definíciója [B, 2], (4,26), (4,27) és (4,29) formulájával adott, a rácsállandó-változáson kívül csak a mátrix tulajdonságaitól függenek, $\sigma^{(1)} + \Delta \sigma$ hatása a rácsállandó 0,092 relatív változása (Cu—Ge) esetén σ^0 -hoz képest $\sim 3,5\%$, elhanyagolható. Alá kell azonban húznunk, hogy az eltolódott mátrixatomokon való szórás elvben éppen úgy befolyásolja a szennyezési ellenállást, mint a töltéssűrűség-oszcillációt, és ebből a szempontból egyik sem jobb módszer a másiknál [G, 3]. Az irodalomban a fáziseltolódások meghatározásánál mindenki a (III.15) összefüggést használta.

c) Szennyezések kölcsönhatása

A szennyezések kölcsönhatásának kérdését nagyon röviden érintjük [D, 5], mert feltevésünk szerint hatása nagyon híg ötvözetek esetén elhanyagolható.

A szennyezések közti elektrosztatikus kölcsönhatás a hosszútávú elektronsűrűség-oszcilláció következménye. *Blandin* és *Deplante* (lásd [D, 5]) ennek alapján kiszámolta a rácsállandó relatív változását. A réz alapú híg ötvözetekre vonatkozó kísérleti görbét (rácsállandóváltozás-rendszám) jól követi az elméleti görbe, azonban az egyes ötvözeteknél gyenge az egyezés.

A mágneses kölcsönhatás [F, 4] és [B, 6], [B, 7] nagyobb koncentrációknál a lokalizált momentumok mágneses rendeződéséhez vezet.

D. Fáziseltolódások meghatározási módszerei

A felsorolt mérhető mennyiségekben (az α és λ faktortól eltekintve) az ismeretlen mennyiségek a szórt parciális hullámok fáziseltolódásai, amin nem is csodálkozunk, ugyanis a síkhullámok szóródása nem nagy kiterjedésű potenciálokra leírható a fáziseltolódások segítségével, függetlenül a potenciál részleteitől [S, 2]; tehát a fáziseltolódások ismerete továbbjutásunk kulcsa. Összefoglaljuk és röviden jellemezzük az irodalomban található elméleti és félempirikus módszereket, megadva azt is, hogy a híg ötvözetek melyik csoportjánál, milyen fizikai mennyiség értelmezésénél használták. A módszerek lényegét táblázatban foglaltuk össze (III. táblázat). A fáziseltolódások értékét az eredmények kiértékelésénél (VII. fejezet) az egyes ötvözeteknél adjuk meg.

a) Elméleti módszerek

Lényegük, hogy a modell potenciálon és a szelf-konzisztenciát biztosító Friedel-féle összegszabályon túlmenően más mennyiséget nem használnak fel a fáziseltolódások meghatározásánál.

1. Pszeudoatom-fáziseltolódások

A kérdéssel kapcsolatban *Ziman* [Z, 1] *Harrison* [H, 1] és *Heine* [H, 2] munkáira utalunk. Az alap a Ziman-féle pszeudoatom (ion + árnyékoló töltés)-fogalom. A szabad elektron $U + U_s$ (U : törzs, U_s : árnyékoló potenciál) potenciállal felírt Schrödinger-egyenletét pszeudopotenciál technikával oldják meg. A fáziseltolódások meghatározása a megfelelő transzformációval bevezetett pszeudopotenciálból azért előnyös, mert az egyéb területeken, pl. sávszerkezet-számolásnál bevált pszeudopotenciál alapján a felsorolt mennyiségek (pl. térgradiens, szennyezési ellenállás stb.) elméletileg számolhatók és a kísérleti eredményekkel összehasonlíthatók, továbbá látszólag távoleső fizikai mennyiségek ugyanazon modellre visszavezethetők.

Ami a konkrét számolást illeti, *Meyer* és *mtsai* [M, 3] meghatározták az egyvegyértékű fémek fáziseltolódásait és a fáziseltolódások energia szerinti deriváltjait is az impulzusmomentum (l) és az energia függvényében. Eredményeiket táblázatok tartalmazzák.

A kapott eredményekből könnyen számolható pl. egy vakancia által keltett töltéssűrűség-oszcilláció, hozzájárulás az ellenálláshoz (lásd VIII. fej.), vagy egy el-

tolt (nem köbös szimmetriájú helyen levő mátrixatom hozzájárulása a térgradienshez (lásd V. fejezet).

Az azonos valenciájú szennyezés-mátrix párja a megfelelő fáziseltolódások a pszeudopotenciálok különbsége alapján [D, 4].

$$\eta_l = \eta_{l\text{mátrix}} - \eta_{l\text{szennyezés}}, \quad (\text{III. 17})$$

és a fáziseltolódásokat a mátrix Fermi-energiájánál kell venni. (III. 15) összefüggés alapján Dickey és mtsai [D, 4] alkáli-alkáli híg ötvözetek szennyezési ellenállását, Thornton és Young [T, 2], illetve Thornton és mtsai [T, 3] ugyanezen ötvözetek (szilárd és folyékony) Knight-eltolódását értelmezték sikerrel (az egyezés kettes faktoron belül jó!). Kevésbé jó egyezést értek el *nemesfém-nemesfém* híg ötvözetek szennyezési ellenállásának [D, 4], illetve Knight-eltolódásának [T, 2] az értelmezésénél. Az alkalmazás azonos valenciájú mátrix-szennyezés párja történt. A siker természetesen a pszeudopotenciál jóságától függ.

2. Blatt-módszer [B, 11]

A fáziseltolódások számítása szabad elektronok derékszögű potenciálvölgyön bekövetkező szóródása alapján történt. A derékszögű potenciálvölgy paramétereinek a megválasztása önkényes. A potenciál kiterjedése az

$$r' = \left(\frac{3\Omega}{4\pi} \right)^{1/3} \cdot \left(1 + \frac{\delta v}{\Omega} \right)^{1/3},$$

($\delta v/\Omega$ a szennyezés-cella relatív térfogatváltozása) összefüggést, a potenciálvölgy mélysége pedig a módosított (III. 4) Friedel-féle összegszabályt elégíti ki. Emlékeztünk arra, hogy *Beal Monod* és *Kohn* [B, 2] a Friedel-féle összegszabály Blatt-féle módosítását csak hosszúhullámú közelítésben találta igaznak.

Blatt eredetileg négy fáziseltolódást határozott meg, a kapott eredmények alapján jól írható le a szennyezési ellenállás. Ugyanezt a módszert sikerrel alkalmazta *Blandin—Friedel* és *Daniel* [B, 9], [B, 10], [B, 2] a mátrixatomok Knight-eltolódásának az értelmezésénél (Cu, Hg és Na alapú híg ötvözetek). Nem jó az egyezés az azonos valenciájú mátrix-szennyezés páron mért kísérleti eredményekkel.

b) Félempirikus módszerek

Elméleti összefüggések felhasználásán túlmenően valamilyen mért mennyiség beépítése jellemzi az alábbi módszereket.

1. Kohn—Vosko-módszer [K, 4]

Időrendi sorrendben ez az első félempirikus módszer. A szennyezési ellenállásra felírt (III. 15) összefüggést, a Friedel-féle összegszabályt (III. 2), illetve a mért szennyezési ellenállást és a valenciakülönbség alapján megadható ΔZ értéket használja fel két fáziseltolódás η_0 és η_1 meghatározására, feltéve természetesen azt, hogy az első két fáziseltolódás a domináns.

A módszer hátránya félempirikus jellegén túlmenően az, hogy $\Delta\varrho$ η_1 -ben másodrendű, így az egyenletrendszer több fáziseltolódás-pár is kielégítheti. Közülük választani csak a kísérlettel való egyezés alapján lehet.

A „nem egyértelműséget” a többi félempirikus módszer is magával viszi, érdekes módon azonban minden szerző csak a másik dolgozatban veszi észre a hiányosságot (lásd pl. [H, 4]).

Kohn—Vosko az így meghatározott fáziseltolódásokat *Cu*-alapú híg ötvözetek másodrendű kvadrupól effektusának értelmezésére, Griffels és mtsai [G, 2] *Ag*-alapú híg ötvözetek mátrix magjai Knight-eltolódásának értelmezésére használják, elfogadható sikerrel.

A módszer Blatt-korrekcióval (III. 2) helyett (III. 4) összefüggés kiegészített változatát alkalmazzák *Roberts* és mtsai [R, 4], többek között *Cu—Au* híg ötvözeteken a szennyezési ellenállás és a Mössbauer-spektrum izomer eltolódásának az összefüggését vizsgálva. A kapott eredmény a szennyezési ellenállást természetesen definíciószerűen, az izomer eltolódást a normálási faktortól eltekintve írja le. Lényegesnek tartjuk megemlíteni, hogy az izomer eltolódás érzékenyen függ η_0 előjelétől, így a két megoldás közül könnyen választhatunk.

2. Hurd—Gordon-módszer [H, 4]

Tulajdonképpen a Blatt- és Kohn—Vosko-módszerek kombinációjának tekinthető (a szerzők a Blatt-korrekcióval együtt alkalmazták, ami azonban nem szükséges velejárója a módszernek). Tetszés szerinti számú fáziseltolódás meghatározására alkalmas Born-közelítésben, kihasználva a parciális hullámok fáziseltolódásai közti ismert összefüggést (lásd pl. [M, 2] vagy [H, 4]). A konkrét számolásnál $l_{\max} = 8$ -ig mentek el, meghatározva a fáziseltolódásokat és azok energia szerinti deriváltjait.

A derékszögű potenciálvölgy kiterjedését és mélységét úgy határozták meg, hogy a kapott fáziseltolódások a szennyezési ellenállást (III. 15) és a módosított Friedel-féle összecsabályt (III. 4) elégítsék ki.

Előnye, hogy nem két fáziseltolódást határoz meg, továbbá a potenciálvölgy kiterjedésének meghatározását Δq -ra vezeti vissza (az önkényes Blatt-féle választás helyett), hátrányai ettől eltekintve azonosak a III. a 2. és III. b. 1. módszerekével.

Az eredmények alapján a *Cu* alapú folyékony híg ötvözetekben a mátrix Knight-eltolódását számolják eltérő valenciájú szennyezés esetén; elfogadható az egyezés a termofeszültséggel, összehasonlítás az elektron fajhő-járulékkal, a Hall-állandóval és a szuszceptibilitással.

3. Alfred—Van Ostenburg-módszer [A, 3]

A Hurd—Gordon-módszerhez hasonlóan tetszőleges számú fáziseltolódás meghatározását teszi lehetővé (időben előbbi a Hurd—Gordon-félénél), szintén a Blatt és Kohn—Vosko-féléből származtatható, de eltérő potenciált használ. Tekintettel arra, hogy a magasabb indexű fáziseltolódásokat az origótól nagyobb távolságra levő potenciál határozza meg, egy az elektron elméletben használt nagyobb távolságban ismert $V(r) = \frac{1}{r} \sum_{u=1}^{\infty} C_u \exp \{-uqr\}$ ($C_u > C_{u+1}$, q : árnyékolási állandó) alakú potenciált alkalmaztak.

Felhasználva a fáziseltolódások között Born-közelítésben fennálló összefüggést [A, 3] (3 formula), a Friedel-féle összecsabállyal (III. 2) és a szennyezési ellenállás (III. 15) összefüggésével három egyenlet áll rendelkezésünkre a fáziseltolódások meghatározására. A megoldás ugyanúgy nem egyértelmű, mint a már említett félempirikus módszereknél.

A számolt fáziseltolódások alapján nagyon jó egyezést kaptak a szilárd Ag és folyékony Cu alapú ötvözetekben a mátrixmagok rezonanciavonaleltolódásának (Knight-eltolódás) értelmezésekor.

4. Titman—Kellington-módszer [T, 1]

A szerzők két fáziseltolódást határoznak meg a módosított Friedel-féle összegszabály (III. 4) és a töltéssűrűség-oszcillációból származó Knight-eltolódás mért értéke alapján. (A megoldás egyértelműségéről itt sem esik szó!). Az eredmények „szép egyezést adnak” a Li — Mg szennyezési ellenállásával. A Li alapú híg ötvözetek elsőrendű kvadrupól effektusa nem írható le a számolt α -val (Li mátrixra $\alpha=1,5$); α -t paraméternek tekintve csak akkor írható le, ha $2,3 \leq \alpha \leq 3,6$ között változhat. (Talán ezek a szám adatok is segítenek a terület „egyezés-nem egyezés értékének” a kialakításában.)

Az eddig ismertetett módszereket nem-átmeneti fém szennyezést tartalmazó híg ötvözetekre alkalmazták. Ami a félempirikus módszereket illeti, további módszerek konstruálhatók a kiindulási mennyiségektől függően. A siker attól függ, hogy az elméleti összefüggés mennyire hű képe a valóságnak. Röviden megemlékezünk a Faber-féle diagramról [F, 7], amely arról ad felvilágosítást, hogy a felhasznált mennyiségek mennyire érzékenyek a fáziseltolódások változására. *Titman* és *Kellington* [T, 1] a Friedel-féle összegszabályt, a szennyezési ellenállást és a Knight-eltolódást elemzi.

c) Átmeneti fém szennyezések fáziseltolódásai

Nem-mágneses átmeneti fém szennyezések okozta fáziseltolódások meghatározására eddig egyetlen módszert ismertetnek [B, 3], nem beszélve a „csak rezonancia-szórás”-feltételezés alapján a Friedel-féle összegszabályból triviálisan adódó, vagy az Anderson-modell nem-mágneses határesetében meghatározott elméleti $\eta_2 = \frac{N\pi}{10}$ értékről (III.B.a.).

A *Beal Monod* [B, 3] által kidolgozott módszer lényege: a módosított Friedel-féle összegszabályból (III. 4) a szennyezési ellenállásból (III. 15) és a másodrendű kvadrupól effektus „kiszórási szám”-ából* (lásd kiértékelési módszerek VII. A.) a (III. 11)-formula alapján gépi úton három fáziseltolódást határoz meg. A szerző szerint a Cu — Pd és Cu — Pt híg ötvözetekre csak olyan megoldás (η_0, η_1, η_2) elégíti ki a három egyenletből álló egyenletrendszert, amelyik fizikailag a virtuális állapotnak felel meg (domináns η_2); Cu — Ni esetén a megoldás nem egyértelmű, csak egyik a virtuálisan kötött állapotnak megfelelő.

Nem túlságosan megnyugtató az aszimptotikus összefüggés Cu — Ni -re való alkalmazása, ahol a másodrendű kvadrupól effektus mindössze az első két koordinációs héjra terjed ki. A módszer létjogosultságát egy független mérés értelmezésénél elért sikere bizonyítaná a legjobban.

* A másodrendű kvadrupól effektus „kiszórási száma” és az elektromos térgradiens összefüggése a *Kohn—Vosko* által használt! „all-or-nothing” kiértékelési módszerben az önkényesen választott q_{kr1t} paramétértől függ (VII. A. fejezet).

III. táblázat
Fáziseltolódások meghatározási módszerei*

Jellemző Módszer	Friedel-féle összegszab.	Blatt- korrekció	Konkrét potenciál	A félémpirikus módszer összefüggése			Fáziseltolódások						A fáziseltol. alapján számolt mennyiség**			Megjegyzés
				Szenny, ellenáll.	Knight, eltol.	Térgrad.	η_0	η_1	η_2	η_3	η_4	η_5	Szenny, ellenáll.	Knight- eltol.	Térgrad.	
Pszedó atom	+	-	+	-	-	-	+	+	+	+	-	-	+	+	+	Nem átmeneti fém- szennyezés
Blatt	+	+	+	-	-	-	+	+	+	+	-	-	-	+	+	
Kohn— Vosko	+	-	-	+	-	-	+	+	-	-	-	-	0	+	+	
Hurd— Gordon	+	+	+	+	-	-	+	+	+	+	+	+	0	+	+	
Alfred— Van	+	-	+	+	-	-	+	+	+	+	+	-	0	+	+	
Ostenburg Titman— Kellington	+	+	-	-	+	-	+	+	-	-	-	-	+	0	+	Átmeneti fém- szennyezés
Beal Monod	+	+	-	+	-	+	+	+	+	-	-	-	0	-	+ / 0	

* A táblázat nem tartalmazza a csak rezonanciaszórás-feltételezés alapján meghatározott fáziseltolódásokat.

** A félémpirikus módszerben felhasznált mennyiséget 0 jel jelzi. Ebben az oszlopban saját eredményeink is benne vannak; a Beal Monodnál feltüntetett térgadiens saját elsőrendű kvadrupól effektus eredmény.

Ami a *mágneses* virtuális állapotot illeti, a rezonanciaszórás-feltételezés alapján a spinfüggő Friedel-féle összegszabályból [B, 6], [B, 7]

$$Z = \frac{5}{\pi} (\eta_2^\dagger + \eta_2^i), \quad \text{és}$$

a szennyezésen lokalizált mágneses momentumból

$$m = \frac{5\mu_B}{\pi} (\eta_2^\dagger - \eta_2^i)$$

határozható meg a két rezonáns fáziseltolódás.

A III. fejezet *összefoglalását* részben a III. A. részben a III. B. pontok végén megadtuk. A fejezet tartalmazza még a mérhető mennyiségekre vonatkozó elméleti összefüggéseket és a fáziseltolódások meghatározási módszereit, amelyeknek a lényegét a III. táblázatban külön összefoglaltuk.

IV. Irodalmi eredmények és következményeik

A IV. fejezetben felsoroljuk azokat az irodalmi eredményeket, amelyekre szükségünk lesz. A kvadrupóleffektus-mérések alapján megoldatlan kérdésekre, az irodalomban elterjedt, nem mindenben helytálló nézetekre hívjuk fel a figyelmet, és konkrétan megfogalmazzuk a disszertáció célkitűzését. Az irodalmi eredmények csoportosítása: kvadrupól effektus és egyéb. Tekintettel arra, hogy nincs elsőrendű kvadrupóleffektus-mérés réz alapú híg ötvözeteken, így saját eredményeinket sem tudjuk más mérési eredményekkel összehasonlítani, a felsorolt eredmények a közvetett összehasonlítás és a célkitűzés megfogalmazásának az alapjául szolgálnak.

A. Irodalmi eredmények

A jelen munka szempontjából szükséges mérési eredményeket a IV. táblázatban foglaltuk össze: közös vonásuk, hogy a III. fejezetben vázolt elmélet alapján értelmezhetők, és a kísérleti adatok közül a legjobb egyezést adják az elmélettel; két csoportra oszthatók: először felsoroljuk a nem kvadrupóleffektus-mérési eredményeket, hivatkozva az értelmezés mikéntjére, majd részletesen ismertetjük a réz alapú híg ötvözetek másodrendű kvadrupóleffektusára vonatkozó méréseket.

a) Egyéb mérések

A teljesség igénye nélkül, először az olvadt állapotban levő híg ötvözetek Knight-eltolódás mérési eredményeit idézzük [O, 1], [G, 1]. A mért értékek a IV. táblázatban találhatók. Értelmezésük nem mágneses szennyezésre a (II, 14. a.) formula alapján történt. A formulában előforduló együtthatók (A_1 , B_1) a folyadék-szerkezetre átlagolt értékek. A Blatt-, ill. Kohn- és Vosko-féle fáziseltolódások alap-

* A Knight-eltolódást általában elfedi a kvadrupól effektus, ezért megfigyelése réz alapú híg ötvözetekben a kvadrupól effektus kiátlagolása esetén, tehát olvadéokban lehetséges.

IV. táblázat: Irodalmi mérési eredmények Cu-alapú híg ötvözeteken

Menny. Ötvözet	$\frac{1}{a} \frac{d\alpha}{dc}$ [at % ⁻¹] [P, 2]	$\frac{\Delta\alpha}{\mu\Omega \text{ cm}}$ atom % [L, 2]	Másodrendű kvadrupóleffektus		Knight-eltolódás folyékony állapotban		Egyéb
			n_c 4 MHz-en	Értelmezés C	$-\frac{1}{K} \frac{\partial K}{\partial c}$	Értelmezés	Lokal. mom. [μ_B]
Cu—Zn	0,056	0,32	18 [R, 5]	[R, 5] és [K, 4] közös, Kohn—Vosko-féle fáziseltolódások alapján; (III, 11) formula; 1,25, ill. 0,58 faktor	0,19 [0, 1]	[0, 1] a Kohn—Vosko- és Blatt-féle fázis alapján (III, 14a) formulából a folyadékra vonatkozó állandók [0, 1]-ben adottak	—
Cu—Au	0,15	0,55	44 [R, 5]	[S, 1] (III, 11) + (III, 12) formula $\alpha=23$, $\lambda=-15$	0,07 [0, 1]		—
Cu—Ni	-0,026	1,25	19 ^A [R, 6] 28 ^B [C, 2]	[B, 3] (III, 11) formula; Beal Monod-fáziseltolódások; all-or-nothing modell; 1,5 faktor	1,15 [0, 1]	[0, 1] (III, 14a) formulából (lásd fenn) és $\eta_2=9\pi/10$ fáziseltol. alapján, Cu—Ni-re.	
Cu—Pd	0,091	0,89	38 [R, 6]		—		—
Cu—Pt	0,101	2,1	60 [R, 6]		—		—
Cu—Mn	0,112	2,8—3	114 [L, 3]	[L, 3] (III, 11) és (III, 9) formulák alapján [D, 1] fáziseltolódásaival lásd szöveg III. fejezet.	19,4 ^D [G, 1]	[G, 1] (III, 14b) formula, állandók [G, 1]-ben	4,26 + 0,15 [G, 1]

A: az ábra és szöveg közötti ellentmondást már említettük;

B: *Chapman* és *Seymour* [C, 2] 3 MHz-en mért eredménye;

C: az elméleti eredményeket a megadott faktorról szorozni kell a kísérletekkel való egyezéshez;

D: ábráról becsült érték.

ján számolt elméleti értékek kisebbek, illetve nagyobbak, mint a mért értékek, jó az egyezés az Alfred—Van Ostenburg-féle fáziseltolódások alapján számoltakkal.

Cu—Mn hígötvözet-olvadékon mért Knight-eltolódás maximális a Cu—3d átmeneti fém szennyezés-sorban, értelmezése [G, 1] a (III. 14. b.) formulával leírt spinsűrűség-oszcilláció okozta Knight-eltolódás alapján, felhasználva a szuszeptibilitásmérések eredményeit.

Továbbá a IV. táblázatban megadjuk az általánosan ismert kézikönyvekben található szennyezési ellenállás és szennyezés okozta rácsdeformáció értékét, amire vagy hivatkozunk, vagy felhasználjuk a kiértékelésnél.

Az elméleti és kísérleti értékek összehasonlítására az egyes ötvözeteknél saját eredményeink diszkussziójával párhuzamosan még visszatérünk.

b) Kvadrupól effektus-mérések

Amint már említettük, az összefoglalás rövid, az érdeklődő olvasó az eredeti irodalomban megtalálja a részleteket. Külön megemlítjük a kiértékelés módszerét, ugyanis a mért „kiszórási” szám és az elektromos térgradiens közti kapcsolat nem triviális. A másodrendű tartományban alkalmazott kiértékelési módszereket nem itt ismertetjük, hanem az elsőrendű mérések kiértékelésénél, és utalunk arra, hogy az ott használt kiértékelés másodrendben alkalmazott eredetije kinél található meg.

1. Rowland eredményei [R, 5]

A sokszor idézett cikk a nem-átmeneti fém szennyezők, Mg, Zn, Cd, Al, Ga, Jn, Si, Ge, Sn, P, As, Sb, Ag, Au által keltett, másodrendű kvadrupóleffektusra vonatkozó szisztematikus vizsgálat eredményeit tartalmazza. A mérések 0,5...8 at % második komponens tartalmú pormintákon történtek. Hőkezelés hatására a hidegen reszelt pormintákon mért MMR jelintenzitás a hibahatáron belül nem változik. A kvadrupóleffektus erősségének számszerű mutatója az n_c kiszórási szám, a $\log D/D_0 - \log c$ (D/D_0 a tiszta rézre normált centrális komponensjárulék, c szennykonzentráció) görbe iránytangense.

A (III, 1) formulával történő összehasonlítást részben Kohn—Vosko [K, 4], részben maga Rowland végezte el. KV az all-or-nothing modellt és az általuk meghatározott fáziseltolódásokat használják fel az összehasonlításnál. Rowland egy közelítő jelalaknak és a derivált jel csúcsától csúcsig vett intenzitásának a Kohn—Vosko-féle térgradiens alapján számítógéppel számolt értékét hasonlítja össze a kísérleti értékkel. Rowland szerint a Kohn—Vosko-féle térgradienst 1,1...1,5 faktorral szorozni kell, hogy a kísérlettel egyező eredményt kapjon.

Végeredményül a $q(r) \sim r^{-3}$ függést bizonyítottnak tekinti, jó a koreláció a térgradiens erőssége (kiszórási szám) és a szennyezés-mátrix valenciakülönbség között, ugyanakkor n_c és a rácsdeformáció között nem látszik összefüggés.

2. Sagalyn és mtsai [S, 1] eredményei

Tulajdonképpen Rowland előző pontban említett mérésének újraértékeléséről van szó. Az új gondolat az, hogy a (III, 11) formulával leírt „töltés”-effektushoz a szennyezés okozta rácsdeformációból származó „méret”-effektus ((III, 12)-formula) adódik; ez utóbbi a röntgendiffrakcióval meghatározott $1/a \cdot da/dc$ egységnyi koncentrációra vonatkozó, viszonylagos rácsállandó-változással arányos. Ez a feltevés a szennyezés közvetlen környezetében erősen vitatható [F, 6].

Kiértékelési módszerükben az egy szennyezésre extrapolált kiszórási számot hasonlítják össze a mérés (elsődrendű kvadrupóleffektus tartományba eső változatát a VII. fejezetben ismertetjük).

A kiértékelés során α -t és λ -t paraméternek tekintik. A legjobb egyezéssel kapott numerikus érték nagyságrendileg eltér az irodalomban található más módon meghatározott λ értékektől. E problémára az V. fejezetben még visszatérünk.

Következtetések: a deformáció okozta térgradiens figyelembe vétele jobb egyezésre vezetett a kísérleti és elméleti eredmények között.

A „töltés”- és „mért”-effektus közel azonos nagyságú. A λ érték eltérése a többi irodalmi értéktől részben a vonalkiszélesedés elméleti és kísérleti értékének eltéréseivel kapcsolatos (a deformált tiszta rézen kapott λ -kat vonalszélesség-mérésekből határozták meg, V. fej.).

További javulást várnak a nem tengelyszimmetrikus térgradiensek figyelembe vételétől.

3. Átmeneti fém-szennyezés

Alig van megemlíteni valónk. A *nem mágneses* átmeneti fém-szennyezést tartalmazó Cu alapú híg ötvözetek közül Rowland [R, 5] valamint Rowland és Shiotani [R, 6] (lásd még [B, 3]) határozta meg a másodrendű kvadrupóleffektus kiszórási számait Cu—Ni, Cu—Pd és Cu—Pt híg ötvözeteken, n_c értéke rendre 19; 38; 60. Rowland [R, 5] eredeti ábrájáról 24 érték olvasható le Cu—Ni-re, a szöveggel ellentétben.

Cu—Ni-re ismeretes még Chapman és Seymour [C, 2] mérése hőkezelt mintán; a 3 Mc/s-on kapott $n_c = 28 \pm 2$ és 7 Mc/s-on pedig 18 ± 1 . A mérés kiértékeletlen. Rowland és Shiotani eredményeit Beal Monod értékelte ki az „all-or-nothing”-modell és az általa meghatározott három fáziseltolódás alapján [B, 3]. A konklúzió domináns d rezonancia szórás és a szennyezésen lokalizált 0,82 (Cu—Ni), 0,77 (Cu—Pd) és 0,99 (Cu—Pt) $3d$, $4d$, $5d$ lyuk.

Mágneses szennyezőt tartalmazó Cu alapú híg ötvözetek közül csak Cu—Mn-on történtek kvadrupóleffektus-mérések, Matsuo [M, 1] tesz először kvadrupóleffektusról említést. Eredményeit nem értékeli ki, és kiértékelés esetén is gondot okozna az, hogy hőkezelt mintákon mért, továbbá mintái kvadrupóleffektus szempontjából az első- és másodrendű, illetve az átmeneti tartományba esnek (lásd VI. fejezet).

Lumpkin [L, 3] a 0,1...2 at% Mn tartalmú mintákon mért kiszórási számot töltéssűrűség másodrendű kvadrupóleffektus- és spinsűrűség-változásból eredő járulékra bontotta szét, vitathatóan. Az így meghatározott másodrendű kvadrupól kiszórási számok a frekvencia függvényében 4 MHz-ben $n_c = 114$; 8 MHz-en 80; és 12,8 MHz-en 63, anomálishan nagynak tűnnek a Rowland-féle eredményekkel összehasonlítva, az átmeneti fémeket is beleértve. A méréseket Blandin és Caroli [B, 6], [B, 7] értékeli ki a (III, 9—10)-formulák és a Daniel által [D, 1] meghatározott fáziseltolódások alapján, és „kielégítő” egyezést kapnak.

Az irodalomban található [C, 2], [M, 1], [L, 3], továbbá saját nem publikált mérési eredményeink [T, 7] igen nagy szórást mutatnak, ugyanakkor a Lumpkinéval közel azonos koncentrációjú ötvözeteken mért amplitúdók $\log D/D_0 - c$ skálában nem fekszenek egyenesen, szemben Lumpkin mérési eredményeivel (lásd IV. A. b. 1. ábra).

Lumpkin 0,1 at % mintája feltehetően az elsőrendű kvadrupól effektus tartományába esik, így az általa mért effektus első- és másodrendű kvadrupól-spinsűrűség okozta inhomogén Knight-eltolódás és — hőkezeletlen mintákról lévén szó — diszlokációk okozta effektusok keveréke.

Tekintettel arra, hogy az A pontból lényeges információt kell továbbítani, az összefoglalást és annak következményeit külön pontban tárgyaljuk.

B. Irodalmi eredmények összefoglalása, következmények

a) Összefoglalás

Szisztematikus mérés folyt a nem-átmeneti fém szennyezést tartalmazó híg ötvözeteken a nagyobb koncentráció-tartományban, és a másodrendű kvadrupóleffektust tanulmányozták. A Kohn—Vosko-féle elmélet és fáziseltolódások alapján kapott eredmény alulbecsüli a kísérleti eredményeket, az egyezéshez az elméleti értékeket 1,1...1,5 faktossal szorozni kell. Nagyon hiányosak az átmeneti fémszennyezőkre vonatkozó eredmények. A kísérleti és elméleti eredmények között itt is 1,5 faktor eltérés van. A lényeges numerikus eredményeket azokra az ötvözetekre, amelyeken mi is végeztünk méréseket, a IV. táblázat tartalmazza.

Elsőrendű kvadrupóleffektusra vonatkozó mérési eredmény réz alapú híg ötvözetben egyáltalán nincs.

b) Következtetések

A másodrendű kvadrupóleffektusra vonatkozó eredmények úgy terjedtek el az irodalomban, mint „a kvadrupóleffektusra” vonatkozók (lásd pl. Kittel: Quantum theory of Solids [K, 2]), amiből a bevitt szennyezés okozta perturbáció hatótávolságára téves következtetéseket vontak le.

Az azonos nagyságú „méret”-effektus miatt a kvadrupóleffektus vizsgálatát nem tekintették a szennyezés okozta töltéssűrűség-oszcilláció szennyezési ellenállással ekvivalens vizsgálati módszerének [G, 3].

Ami az elmélettel történt összehasonlítást illeti, a szennyezés közvetlen környezetében mért eredményeket aszimptotikus formulák alapján értékelték ki, aminek a jogosultsága legalább is bizonyításra szorul.

c) A disszertáció konkrét célkitűzése

Kézenfekvő, hogy az elsőrendűen perturbált tartomány vizsgálatát tűzzük ki célul, nemcsak azért, mert nem vizsgálták, hanem mert: a várhatóan hosszabb hatótávolságú effektus (q -val és nem q^2 -tel arányos) sokkal több mátrix magot érint, mint a másodrendű, így kevésbé függ φ -től. Az aszimptotikus tartományról ad felvilágosítást, így az aszimptotikus elmélettel való összehasonlítás jogosabb.

Az első- és másodrendű mérés a szennyezéstől két különböző távolságú tartományban való mintavételt jelent, ami azt hiszem egyedülálló lehetőség. Az aszimptotikus viselkedés tisztázása után remélhetőleg mód nyílik a preaszimptotikus viselkedés tisztázására is, azaz a másodrendű kvadrupóleffektus ellentmondásainak a tisztázására.

Valóban híg ötvözetek vizsgálatát teszi lehetővé, szemben a másodrendben perturbált tartománnyal, és így az egy szennyezésre extrapolált kép jogosabb, mint ott.

Ami a szennyezési ellenállással való összehasonlítást illeti, mikrofizikai lényegéből következik az előnye. A töltéssűrűség-oszcilláció jellemzői egyetlen hőmérsékleten történő méréssel meghatározhatók, szemben a szórási hatáskeresztmetszet extrapolációs eljárásával. Így pl. hőmérsékletfüggő szórás (Kondo-probléma, VIII. fejezet) esetén előnyösen használható, nem is beszélve a közvetlen szatellitdetektálás nyújtotta lehetőségekről.

Továbbá célul tűzzük ki a λ empirikus paraméter értékének a meghatározását és a paraméter értelmezését, mert a meglevő bizonytalanság eloszlása híg ötvözeteken végzett mérés kiértékelése szempontjából kulcskérdés. Ezzel a kérdéssel foglalkozunk az V. fejezetben.

V. Mérés rugalmasan deformált kockatexturás réz fólián

A fejezetben tárgyalt mérés célja a szennyezéstől nagyobb távolságban fellépő rácsdeformáció kvadrupóleffektusra gyakorolt hatásának független meghatározása a rugalmassági határig megnyújtott kockatexturás réz fólián. Eltérően a többi fejezettől, a kérdés minden részletét itt tárgyaljuk, mert a probléma önmagában is zárt, és amit a fejezetből a híg ötvözetek területére tovább kell vinnünk, az csak egy becslés az effektus várható nagyságáról.

Áttekintjük az irodalomban található λ empirikus paraméterre vonatkozó értékeket; ismertetjük az általunk végzett kísérlet részleteit, majd annak kiértékelését, megadjuk a λ felső határát, majd rámutatunk arra, hogy a λ paraméter helyett fémfizikai szempontból sokkal értelmesebb mennyiségek használhatók.

A. Irodalmi eredmények

A másodrendű kvadrupól perturbáció tartományába eső híg ötvözeteken *Bloembergen* [B, 12] $\lambda=60$ értéket kapott, a kiértékelésnél csak a „méret”-effektust véve figyelembe.

Sagaly és *munkatársai* [S, 1] Rowland mérési eredményeit újra kiértékelve $\lambda = -15$, illetve $|\lambda|=6,7$ értékeket kaptak, a „töltés”- és „méret”-effektusok összeadási módjától függően. Véleményünk szerint, ha az effektusok egyáltalán összeadódnak, akkor előjelesen adódnak össze. Ezek voltak a másodrendű tartományba eső mérések.

Az elsőrendű kvadrupól perturbáció tartományában: plasztikusan deformált fóliákon *Faulkner* [F, 1] $\lambda \approx 0,4$ -et, *Ogurtani és munkatársai* [O, 2] Faulkner mérését újra kiértékelve $\lambda=0,4$ -et; *Averbuch és munkatársai* [A, 2] reszelt, hőkezeletlen por-mintán $\lambda=1,2$ értéket kapott.

Rugalmasan deformált anizotróp krisztallit orientációjú fóliamintán *Faulkner* [F, 2] felsőhatár becslése $\lambda \approx 7$.

A kapott értékek szórása nagy. Fel kívánjuk hívni a figyelmet arra, hogy a másodrendű tartományban sokkal nagyobb λ -ra van szükség az eredmények értelmezéséhez, mint az elsőrendűen perturbáltban. A látszólagos ellentmondás feloldása valószínűleg az, hogy közvetlenül a szennyezés körül a deformáció lényegesen nagyobb, mint az átlagos [F, 6].

Megjegyezzük még, hogy a kiértékelések során felhasznált pont-ion modellben szükséges összegezést csak az első szomszédokra végezték el.

B. Saját eredményeink

A következőkben az elvégzett kísérlettel, a szükséges elméletekkel és a kísérlet kiértékelésével foglalkozunk, kissé részletesebben.

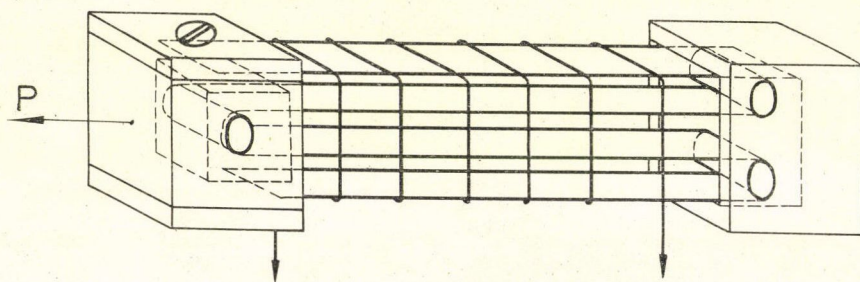
a) A kísérlet és eredménye

A deformáció hatását elvileg legegyszerűbben egy irányban rugalmasan megnyújtott egykristályon lehetne tanulmányozni. A fellépő problémák megkerülése érdekében méréseinket a korábban már alkalmazott kockatextúrás réz fólián végeztük el. A megnyúlás $\langle 100 \rangle_{av}$ iránya közelítőleg a kristallitok $\langle 100 \rangle$ irányával esett egybe, az egyes kristallitok $\langle 100 \rangle$ irányának eltérése az $\langle 100 \rangle_{av}$ iránytól kisebb, mint $6,5^\circ$ [B, 5]. Az irányszórást a kiértékelésnél nem vettük figyelembe.

A méréseket 6,5 MHz frekvencián, szobahőmérsékleten végeztük el, a jel/zaj viszony javítása érdekében a fázisérzékeny detektor után analóg integrátor fokozatot [T, 4] alkalmaztunk. A ~ 50 mg effektív tömegű mintán kapott MMR jel jel/zaj viszonya 50:1. A fóliaminta és a berendezés részleteivel kapcsolatban a korábbi munkáinkra utalunk [T, 5], [T, 6].

A mérőfej konstrukciója a V. B. a-1. ábrán látható. A homogén deformáció biztosítása érdekében csak a fólia két végét rögzítettük, a közbülső fordulási pontban alkalmazott görgőkön a fólia szükség szerint könnyen elmozdulhatott. A fólia keresztmetszete $0,02 \text{ mm} \times 8 \text{ mm}$, a teljes keresztmetszet ennek négyszerese, az alkalmazott húzóerő 3,1 kp, a relatív megnyúlás $3,8 \cdot 10^{-4}$, ami lágy szalagra vonatkozóan a rugalmas határig történő megnyúlást jelent.

Az MMR spektrum amplitúdója és második momentuma a megnyúlás hatására nem változik. Az amplitúdó mérésihibája $\sim 1\%$, a második momentum mérésihibája $\sim \pm 0,2 G^2$.



V.B.a.-1. ábra

Mérőfej és anyagminta a rugalmas deformáció alatt történő MMR méréshez

b) Térgradiens a rugalmasan deformált köbös fémrácsban

Homogén deformációt, pontosabban a rezonanciához hozzájáruló magok helyén azonos térgradienst tételezve fel, elsőrendű kvadrupóleffektus fellépte várható. A szatellitpek frekvencia-eltolódása (lásd II.1 formula) $I = 3/2$ spin és az állandó mágneses térre merőleges, x irányú tengelyszimmetrikus elektromos térgradiens esetén:

$$\Delta\nu = \pm \frac{eQ}{4h} \varphi_{xx},$$

ahol φ_{xx} -el jelöltük az x irányú, H_0 -ra merőleges térgradienst. φ_{xx} -et ponttöltés-közelítésben, a Sholl-elmélet alapján és a fenomenologikus elmélet alapján számoljuk ki.

1. Ponttöltés-modell

A deformációban a lineáris tagot megtartva az összefüggés egyszerűen

$$\varphi_{xx} = \lambda' \varepsilon (1 + \nu) 3e \sum_i \frac{1}{r_i^3} \sin^2 \Theta_i (5 \cos^2 \Theta_i - 1),$$

λ' = empirikus paraméter, r_i : helyvektor, Θ_i , r_i és x által bezárt szög, r_i és Θ_i is a deformálatlan rácsra vonatkoznak, ε az $x \parallel \langle 100 \rangle_{av}$ irányú relatív megnyúlás, ν Poisson-viszony. Digitális számítógéppel az összegzést elvégezve az első n koordinációs héjra

$$\varphi_{xx} = \lambda' e \left(\frac{2}{a} \right)^3 K^{(n)} \varepsilon (1 + \nu)$$

eredményt kaptunk $-K^{(1)} = 2,12$; $K^{(2)} = 0,62$; $K^{(100)} = 1,28$ állandókkal —, ahol a a rácsállandó. Az első koordinációs héjra kapott eredmény megegyezik [F, 1] és [S, 1] eredményével.

2. A Sholl-elmélet alapján számolt térgradiens

Az elmélet [S, 5] szerint a magok helyén levő térgradiens a többi iontól származó oszcilláció árnyékolt potenciálok megfelelő deriváltjainak az összege, az egzakt elektronhullámfüggvénynek ismerete nélkül kiszámítható. A potenciál oszcilláció formája a dielektromos függvény $q = 2k_F$ -nél fellépő szingularitásának a következménye.

A Sholl-elméletben az antishielding faktor [S, 11] figyelembevételén túlmenően szükséges a vezetési elektronok Bloch-karakterének a számításba vétele is ahhoz, hasonlóan, ahogyan Kohn és Vosko [K, 4] és később Beal-Monod és Kohn [B, 2] tette elméletünkben az α növekedési faktor bevezetésével. α számolt értéke 25,5 [K, 4].

Ha az így módosított elméletet az $\langle 100 \rangle$ irányban megnyújtott réz egykristályra alkalmazzuk és a deformációban csak a lineáris tagot tartjuk meg, azt kapjuk, hogy

$$\varphi_{xx} = \alpha \varepsilon (1 + \nu) \sum_i v_2(r_i) \sin^2 \Theta_i (5 \cos^2 \Theta_i - 1),$$

r_i , Θ_i ismét a deformálatlan rácsra vonatkoznak és

$$v_2(r_i) = \frac{A(2k_F)^2}{(2k_F r_i)^5} \{7(2k_F r_i)^2 \sin(2k_F r_i) + [15 - (2k_F r_i)]^2 \cos(2k_F r_i)\}.$$

Az A árnyékolt potenciál amplitúdóját kétféleképpen számoljuk ki:

- a) a Sholl által járt úton; feltéve, hogy az árnyékolatlan potenciál $+e$ iontöltésből származó Coulomb-potenciál, akkor $A = 3,95 \cdot 10^{-2}$ cgs-töltésegység $\cdot \text{cm}^{-1}$;
- b) Beal Monod és Kohn [B, 2] (2,12) összefüggése alapján (ami a fázisfaktortól eltekintve azonos Sholl (3,3) formulájával), felhasználva az irodalomból ismert réz ionokon szórt parciális hullámok fáziseltolódásait [M, 3], [F, 4]

az árnyékolt potenciál amplitúdójára az *a*) pontban megadottól 3%-nál kevesebbel eltérő eredmény adódik. A Beal Monod- és Kohn-féle fázis-eltolódások alapján számolt amplitúdó viszont $\sim 4,5$ faktorral eltér, és ez az érték túlságosan kicsinek tűnik.

A kiértékelésnél $A = 3,9 \cdot 10^{-2}$ cgs töltésségység $\cdot \text{cm}^{-1}$ értékkel számoltunk.

Elvégezve ismét a kijelölt összegezést és $S^{(n)}$ -nel jelölve annak $A(2k_F)^2$ -tel osztott értékét, a következő eredményt kaptuk*

$$S^{(1)} = 0,02244; \quad S^{(1000)} = -0,00348$$

3. Térgradiens-deformációs tenzor

A szükséges térgradiens a deformációk függvényében könnyen felírható a Shulman [S, 7] és Sagalyn [S, 1]-féle fenomenologikus elmélet alapján. A kvadrupól kölcsönhatásban szerepet játszó térgradiens-komponensek

$$\varphi_{ij} = (F_{11} - F_{12})\delta_{ij} \left[\varepsilon_{ij} - \frac{1}{3} \sum_l \varepsilon_{ll} \right] + 2(1 - \delta_{ij})F_{44}\varepsilon_{ij},$$

alakúak, ahol F_{ij} : térgradiens-deformációs tenzor komponensei, ε_{ij} : deformációs tenzorkomponensek, δ_{ij} : Kronecker-delta. Izotrópiát feltéve $F_{44} = \frac{1}{2}(F_{11} - F_{12})$, tehát tovább csökkenthető a független F_{ij} komponensek száma.

Esetünkben azonban szükségtelen a feltételezett izotrópiát kihasználni, mert φ_{xx} -ből a bal oldal második tagja úgyis kiesik. Továbbá az $\varepsilon_{xx} = \varepsilon$, $\varepsilon_{yy} = \varepsilon_{zz} = -\nu\varepsilon$ korábban már alkalmazott jelölésekkel:

$$\varphi_{xx} = \frac{2}{3}(F_{11} - F_{12})\varepsilon(1 + \nu),$$

eredmény adódik, ami azonnal mutatja, hogy a deformációtól való függésnek $\varepsilon(1 + \nu)$ alakúnak kell lennie, amint azt két korábbi modellünkben ténylegesen kaptuk.

Az irodalomból [F, 1], [S, 1] $(F_{11} - F_{12})$ kifejezhető λ' -vel. A Sholl-moddal való összehasonlítás a fenomenologikus $(F_{11} - F_{12})$ mélyebb fizikai értelmét adja. A vezetési elektronok Bloch-karakterét figyelembe véve λ' és $(F_{11} - F_{12})$ végül is α -ra, a Kohn—Vosko-féle növekedési faktorra vezethető vissza.

c) A mérések kiértékelése

A vonalszélességnél nagyobb szatelliteltolódás esetén $\Delta\nu$ közvetlenül megmérhető és így λ' -re, vagy α -ra is könnyen kapható kísérleti érték.

Az MMR jel szélességénél kisebb eltolódásnál a rezonancia jel második momentumának, illetve amplitúdójának a változásából határozható meg $\Delta\nu$ (ill. λ' vagy α) [S, 7] alapján a második momentum dipól-dipól és kvadrupól járulékeinak additívítását, az integrális intenzitás deformációval szembeni invarianciáját, és Gauss-jel alakot feltéve

$$\Delta\nu = \left\{ \frac{M_2^0}{S} \left(\frac{D_0}{D} - 1 \right) \right\}^{1/2},$$

* Az 1. és 2. pontban előforduló összegezés Jánosy A. munkája. A szerző köszönetét fejezi ki érte.

összefüggés adható meg, ahol M_2^0 a deformálatlan rács $\langle 100 \rangle \| H_0$ irányban mért második momentuma, D_0 , illetve D a derivált jel csúctól csúcsig mért amplitúdója deformáció előtt és után, S : relatív szatellit-intenzitás.

A közelítőleg 1%-os amplitúdó mérési hibán belül az amplitúdó a deformáció hatására nem változik. Ennek alapján felső határ adható meg a szatellitrek frekvencia eltolódására:

$$\Delta\nu \leq 370 \text{ Hz.}$$

A ponttöltés-modellből az első száz koordinációs héjra történt összegzés alapján

$$\lambda' \leq 2,4$$

érték adódik. λ -val jelölve azt az értéket, amelyet az első szomszédok térgradiens-járulékának a figyelembevételével kapunk (az irodalmi összehasonlítás kedvéért)

$$\lambda \leq 1,5$$

határfeltétel adható meg, jó egyezésben az elsőrendű kvadrupóleffektus tartományában mértekkel.

A módosított Sholl-elmélet alapján számolt értékből (1000 koordinációs héjra összegezve)

$$\alpha \leq 25$$

határ adódik, ami elfogadható eredménynek tűnik.

Összefoglalva a λ probléma tisztázására egy könnyen értelmezhető kísérletet terveztünk (amelyik mentes az olyan önmagukban is problematikus kérdésektől, mint a diszlokációk deformációs tere és az általuk keltett töltéssűrűség-oszcilláció — Faulkner, Averbuch mérései —) és végeztünk el. A kapott negatív kísérleti eredmény alapján $\lambda \leq 1,5$ határértéket kaptunk, ami feljogosít arra, hogy a deformáció keltette térgradienst mérési eredményeink kiértékelésénél első közelítésben elhanyagoljuk. A Sholl-elmélet alapján értelmeztük a λ empirikus paramétert, és meghatároztuk az α faktor felső határát.

VI. Mérési eredmények híg ötvözeteken

A VI. fejezetben a modell-anyagok kiválasztását, az anyagminták elkészítését és mérési eredményeinket foglaljuk össze. Mérési eredményeink közül azokat adjuk meg, amelyek a szennyezés körüli töltéssűrűség-oszcilláció aszimptotikus viselkedésének megértéséhez szükségesek, illetve az irodalommal való összehasonlítás kedvéért megadjuk a másodrendű tartományban mért adatokat. A fejezet nem tartalmazza azokat a mérési eredményeinket (pl. MMR-spektrumok), amelyeknek az interpretációjával nem foglalkozunk. Így megemlítjük csupán, hogy az elsőrendű kvadrupól perturbáció tartományában (tehát kis koncentrációknál) a második momentum, M_2 (definíció [A, 1]-ben) lineárisan nő a koncentrációval, az $M_2 - c$ egyenesek iránytangense a Zn—Pt sorban hasonló növekedést mutat, mint az elsőrendű kiszórási szám.

A. Modellanyagok

Tekintettel arra, hogy a modellanyagok bő elvi választéka áll rendelkezésre, mintáink konkrét kiválasztásánál egy-egy részletprobléma tipikus, lehetőség szerint modellszerű hordozójának a megkeresése volt a szempont, figyelembe véve a metallurgiai és analitikai nehézségeket is.

a) A modellanyagok kiválasztása

A vizsgált anyagminták a következők: $Cu-Zn$, $Cu-Au$, $Cu-Ni$, $Cu-Pd$, $Cu-Pt$ és $Cu-Mn$.

A kiválasztás indoklása nagyon sok triviális elemet tartalmaz.

$Cu-Zn$: $A+1$ többletvalenciával rendelkező Zn^+ szennyezés legjobban megközelíti a szabad elektrongázba merülő $+e$ ponttöltés elvi modelljét. A szennyezés keltette rácsdeformáció kicsi ($1/a \cdot da/dc = 0,056$, a : rácsállandó, c : szennyezés koncentráció) a Zn a Cu periódusos rendszerbeli szomszédja, rézben jól oldódik.

$Cu-Au$: Az Au azonos valenciájú mint a réz, a szennyezés maga körül lényeges rácsdeformációt okoz ($1/a \cdot da/dc = 0,15$), ugyanakkor a Pt nemesfém szomszédja. Az $Au-Pt$ pár lényeges információt adhat a virtuális nívón történő rezonanciaszórásról. Az arany Cu -ban jól oldódik.

$Cu-Ni$, $Cu-Pd$, $Cu-Pt$: A szennyezések a $3d$, $4d$, $5d$ átmeneti fémeknek ugyanabba az oszlopba tartozó tagjai, a nem mágneses átmeneti fém szennyezők tipikus képviselői a vizsgált hőmérséklettartományban. A $Pt-Au$ párról már szoltunk, ugyanakkor a Pt további kellemes tulajdonságokkal rendelkezik, rézben nagyon jól oldódik, a Pt koncentráció meghatározásánál elért analitikai pontosság a legnagyobb, belső oxidációt a $Cu-Pt$ egyáltalán nem mutat [H, 3]. A $Cu-Ni$ fontossága annyira közismert, hogy külön, további indoklás nem kell. A $Cu-Pd$ vizsgálatát a sor teljessé tétele, valamint a szennyezési ellenállás és a másodrendű kvadrupól-effektus kioltási száma közti, az irodalomban meglevő (lásd [B, 3]) ellentmondás feloldására irányuló törekvés indokolja. A rácsdeformációk Ni -től Pt -ig a következők: $-0,026$, $0,091$, $0,101$.

$Cu-Mn$: A legtöbbet vizsgált a $Cu-3d$ átmeneti fém híg ötvözetek közül. A magasabb ($T \geq 0,01 K^\circ$) hőmérsékletek tartományában a lokalizált momentumot hordozó híg ötvözet klasszikus modellje. Ezért választottuk a töltéssűrűség-oszcilláció méréshez is első modellanyagul. A fellépő kellemetlen metallurgiai problémát, a belső oxidációt [H, 3] igyekeztünk megelőzni. A Mn egyébként jól oldódik rézben. Az általa keltett rácsdeformáció: $0,112$.

b) Az anyagminták készítése és jellemzőik

A disszertációban közölt méréseket $15...20 \mu$ vastagságú, hőkezelt fóliákból összerakott mintákon végeztük (részletes leírás [T, 6]).

A minták vagy $99,998$ at% (American Smelting and Refining Company) vagy $99,999$ at% (Johnson—Matthey) tisztaságú rézből indukciós olvasztással készültek. A „master” ötvözet homogenitásának ellenőrzése metallográfiai módszerrel történt. A második komponensül használt fémek tisztasága a gyári katalógus adatai szerint a következők: Zn : $99,95$, Au : $99,9$, Ni : $J-M$ spektrál, Pd : $99,9\%$, Pt : $J-M$, $99,99\%$, Mn : $99,995$ at%, lehetőség szerint minimális ferromágneses szennyezéssel. A „mas-

ter” ötvözet megfelelő hígítása után az öntecseket hidegen hengereltük és általában $\sim 50\%$ deformáció után a végső hőkezelés atmoszférájával azonos atmoszférában ($250\ldots 300^\circ\text{C}$, 2 óra) kilágyítottuk, izotróp krisztallitorientáció elérése érdekében. Minden hengerlései és vágási művelet után a rákerült ferromágneses szennyezést maratással eltávolították a felületről. Az utolsó hengerlés után ellenőrző MMR-mérés, majd a végső hőkezelés következett. A hőkezelés paraméterei a minták egyéb jellemzőivel együtt a VI.A.b.-I táblázatban találhatók.

A táblázatban közöltekhez az alábbi hozzáfűznivalónk van: Cu—Zn híg ötvözet készítésénél a védőgáz használatával a Zn párolgás megakadályozása, a hidrogén hozzáadásával pedig a felületi és esetleges belső oxidáció megelőzése volt a cél.

Cu—Mn ötvözetnél a rövid hőkezelési idővel és a viszonylag alacsonyabb hőmérséklettel egyrészt a *Howling* [H, 3] által vizsgált belső oxidációtól, másrészt a diszlokációtól kívántunk megszabadulni.

A második Cu—Pt sorozat (VI. B. a. 2.) mintái extrém gondnal készültek, 99,9998 atom% tisztaságú Koch—Light rézből (katalógusadat!), a korábbi mintákon szerzett tapasztalatok felhasználásával.

B. Mérési eredmények

A híg ötvözeteken kapott konkrét mérési eredményeinket nem-átmeneti (b) és átmeneti (c) fém-szennyezést tartalmazó ötvözetek szerint csoportosítjuk. Függetlenül e csoportosítástól, azonban először (a) három mérési szempontból lényeges momentumra kívánjuk felhívni a figyelmet. Tehát az a) alpontba sorolt ötvözetek „személytelenek”, kiválasztásuk célszerűségi alapon történt (Cu—Pt az intenzitás-koncentráció összefüggés nagy pontosságú meghatározásához) vagy pedig a kérdés felmerülésekor éppen sorra kerülő ötvözetet használtuk a részletkérdés demonstrálására.

A mérési eredmények — a fóliák textúrák szerkezete miatt — néhány százalékos anizotrópiát mutattak, a közölt eredmények a különböző kristálytani irányokban mért adatok átlagai.

Referencia-mintának tiszta rézmintát (99,999 at% tisztaságú Johnson—Matthey), markerjelnek az ötvözzel együtt behelyezett Al fóliákon detektált ^{27}Al -jelet használtunk. Minden ötvözetnél ugyanazt az Al-mintát használva és a ^{63}Cu és ^{27}Al spektrumot együtt felvéve a normális mintacsere nélkül elvégezhető, ami rendkívül fontos, így a csúctól csúcsig mért amplitúdók mérési pontossága jobb, mint 1%. Amplitúdómérési eredményeink tiszta rézre vannak normálva.

Minden mintán végeztünk mérést a fóliák hideghengerlése után is. A deformált mintákban meglevő diszlokáció-sűrűség lényegesen módosítja a spektrumot, csökkenti az amplitúdót és a ponthibánál lényegesen nagyobb második momentum járulékot ad. A tájékozódni kívánó olvasó figyelmét a saját Al—Ta híg ötvözetén végzett mérésünkre hívjuk fel [T, 8]. A disszertációban összefoglalt vizsgálatoknál inkább megszabadulni kívántunk a diszlokációktól, mintsem az elektronstruktúrára gyakorolt hatásukat vizsgálat tárgyává tenni. A nem közölt eredmények az Al—Ta-on bemutatottakhoz hasonlóan arra hívták fel a figyelmet, hogy a szennyezés okozta elsőrendű kvadrupóleffektus hőkezeletlen mintákon nem vizsgálható.

VI. A. B.-I táblázat: Réz alapú híg ötvözetminták technológiai jellemzői

Ötvözet \ Jell.	Alap anyag	Minták második komponens tartalma atom %-ba	Analízis	A véghőkezelés jellemzői		
				Atm.	Hőm.	Idő/óra
Cu Ref. minta	99,999 at % Johnson— Matthey	—	Katalógus	Nagyvákuum	600 C°	6
Cu-Zn	99,998 at % ASRC	0,031 ± 0,002; 0,102 ± 0,005; 0,214 ± 0,009; 3,37 ± 0,2; 12,54 ± 0,2	Spektrofotometria klasszikus	80 % Argon + 20 % Hidrogén	600 C°	6
Cu-Au	99,998 at % ASRC	0,014 ± 0,001; 0,036 ± 0,002; 0,14 ± 0,01 1,44 ± 0,07; 4,69 ± 0,07	Spektrofotometria klasszikus	Nagyvákuum	500 C°	5
Cu-Ni	99,988 at % ASRC	0,03 ± 0,005; 0,12 ± 0,01 0,39 ± 0,02; 6,03 ± 0,05; 12,05 ± 0,05	Spektrofotometria klasszikus	Nagyvákuum	500 C°	5
Cu-Pd	99,998 at % ASRC	0,066 ± 1,5 %; 0,185 ± 0,5 %; 0,548 ± 0,5 % 1,15 ± 1 %; 2,19 ± 1 %; 6,46 ± 1 %	Spektrofotometria	Nagyvákuum	500 C°	5
Cu-Pt	99,998 at % ASRC	0,010 ± 0,001; 0,036 ± 0,002; 0,081 ± 0,005; 1,0 ± 0,1; 4,4 ± 1	Spektrofotometria	Nagyvákuum	500 C°	5
Cu-Pt második sorozat	99,9998 at % Koch—Light	0,0055 ± 0,0003; 0,008 ± 0,001 0,012 ± 0,001; 0,017 ± 0,001 0,046 ± 0,003	Spektrofotometria	Nagyvákuum	500 C°	5
Cu-Mn	99,998 at % ASRC	0,0052 ± 2 %; 0,0142 ± 2 % 0,027 ± 2 %; 0,046 ± 2 %; 0,104 ± 2 %; 0,53 ± 10 %; 2,3 ± 0,1	Spektrofotometria klasszikus	80 % Argon + 20 % Hidrogén	400 C°	1

a) *Három tipikus mérési eredmény*

1. Az első- és másodrendű tartomány

A másodrendű tartományban a Rowland által használt amplitúdómérés hígabb ötvözetekre való kiterjesztése alapján nem választható szét a domináns első- és másodrendű tartomány (azért használtuk a domináns megkülönböztetést, mert a másodrendű perturbáció minden ötvözetben jelen van, legfeljebb elhanyagolható), ugyanis a $\log D/D_0 - c$ görbe semmiféle törést nem mutat, ezért meghatároztuk az MMR-jelzélesség jellemzőit is, amelyek alapján a két tartomány világosan különválasztható. A VI.B.a.1.-1 ábrán a Cu—Pt ötvözetben kapott eredményeket tüntettük fel. A második momentum is a szélesség változásának megfelelően diszkontinuitást mutat.

2. A $D = D_0(1-c)^n$ összefüggés

A kísérletek által a másodrendű tartományban a hibahatáron belül bizonyított, mégis kritizált [A, 1] $D = D_0(1-c)^n$ összefüggés elsőrendű kvadrupól perturbáció-tartományban való érvényességének bizonyítására különös gondot fordítottunk. A Pt meghatározás nagy fontossága, a belső oxidáció mentesség [H, 3], és jó oldhatóság alapján a Cu—Pt ötvözet látszott legalkalmasabbnak. Az ötvözetekhez szupertisztaságú rezet használtunk, a Koch—Light gyártmányú réz tisztasága 99,9998 at% volt. A minták elkészítése különös gonddal történt.

A homogén híg ötvözet kialakulását metallográfiai vizsgálatok eredményei bizonyítják. A kapott eredmény a korábbival együtt a VI.B.a.2.-1 ábrán látható.

Az ordinátaértékek mintegy száz spektrumra átlagolt értékek, az eredmények a kísérleti hibahatáron belül kitűnően bizonyítják a $D = D_0(1-c)^n$, összefüggés érvényességét.

3. Az átmeneti tartomány

Cu—Pd ötvözeink összetételét úgy választottuk meg, hogy egy ötvözet az átmeneti tartományba is kerüljön. Az amplitúdómérések eredményei a VI.B.a.3.-1 ábrán láthatók.

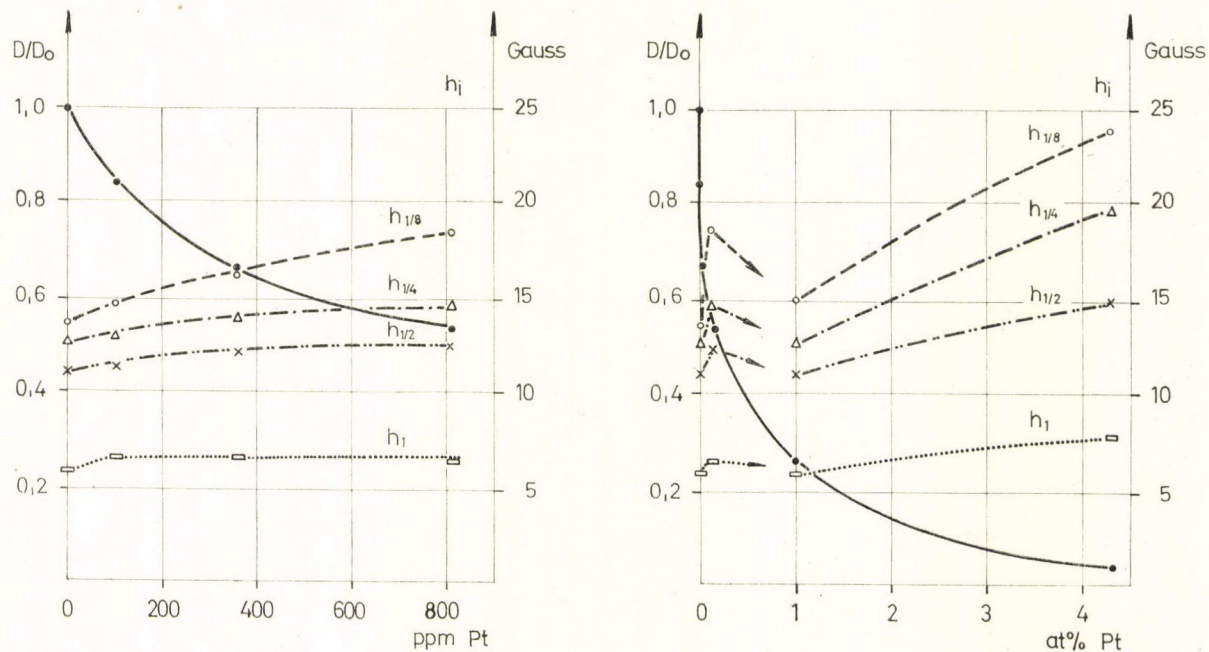
Az átmeneti tartományban (tehát ott, ahol mindkét perturbációt figyelembe kell venni) az intenzitás a megfelelően súlyozott kioltási szám lineárkombinációval (Brettell—Heeger [B, 3])

$$n = 0,6n_1 + 0,4n_c \text{-vel}$$

számolható. Lényegesen fontosabb ennél, hogy a nem megfelelő összetételű ötvözet a csak elsőrendűnek tekintett tartományban csökkenti, a csak másodrendűnek tekintett tartományban pedig növeli a tényleges kioltási számot. A csúcstól csúcsig mért amplitúdó kis koncentrációknál frekvenciafüggetlen, a nagyobb második komponensstartalomnál fordítva arányos a frekvenciával, a másodrendű kvadrupól perturbációnak megfelelően.

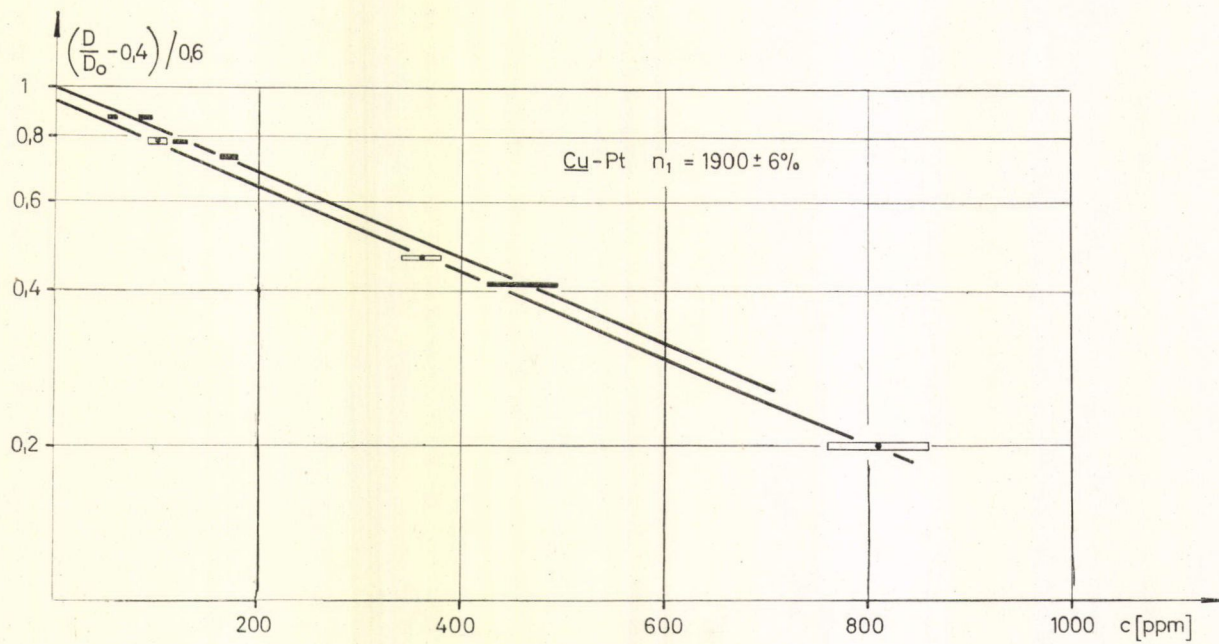
b) *Nem átmeneti fém szennyezést tartalmazó híg ötvözetek*

A bevezető után figyelmünket az elsőrendű perturbáció tartományára kívánjuk fordítani és a Cu—Zn és Cu—Au híg ötvözeteken kapott eredményeket mutatjuk be. A modell-anyagok kiválasztásáról már szó esett.

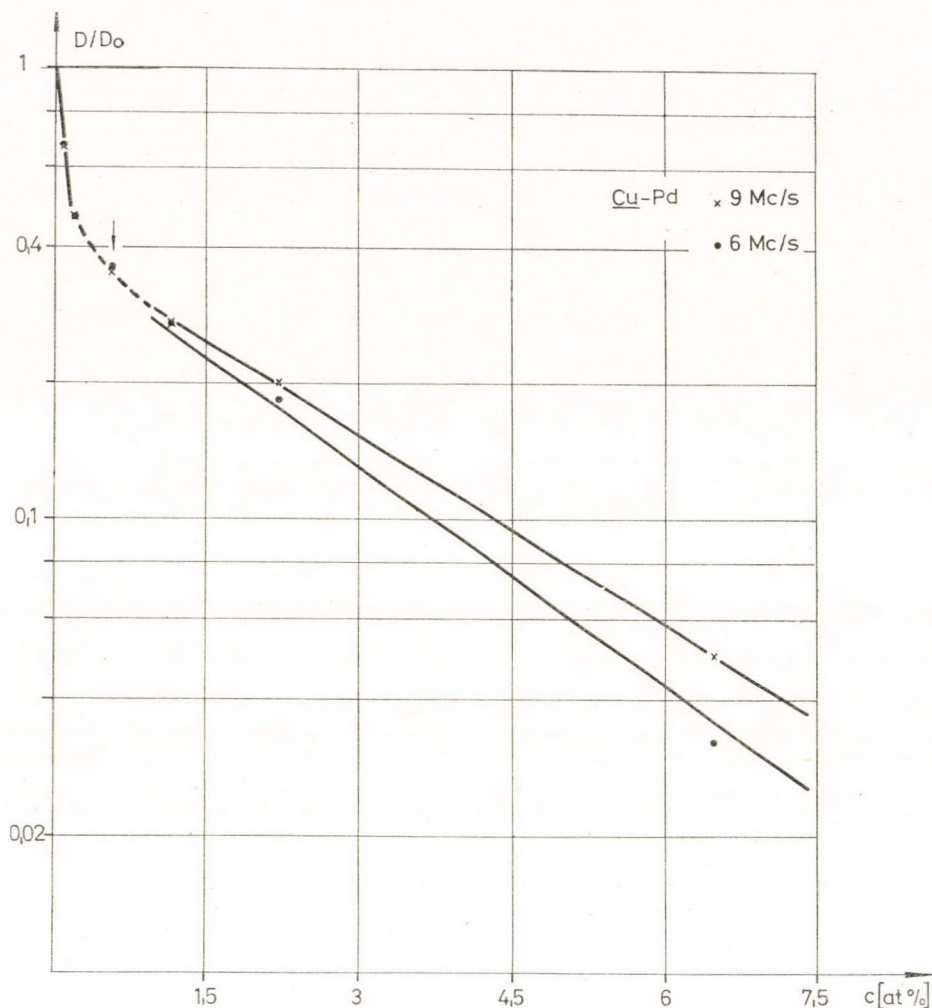


VI.B.a.1.-1. ábra

Az MMR spektrum első és másodrendű kvadrupól effektusa Cu-Pt híg ötvözetben. Az ábra első része az elsőrendű perturbáció tartományát kinagyítva szemlélteti (h_i mennyiségek a derivált jel különböző magasságban mért szélességei)



VI.B.a.2.-1. ábra
Elsőrendű kvadrupól effektus Cu-Pt híg ötvözetben. \blacksquare : Koch—Light, \square : ASRC réz alapú híg ötvözetekben kapott eredmények



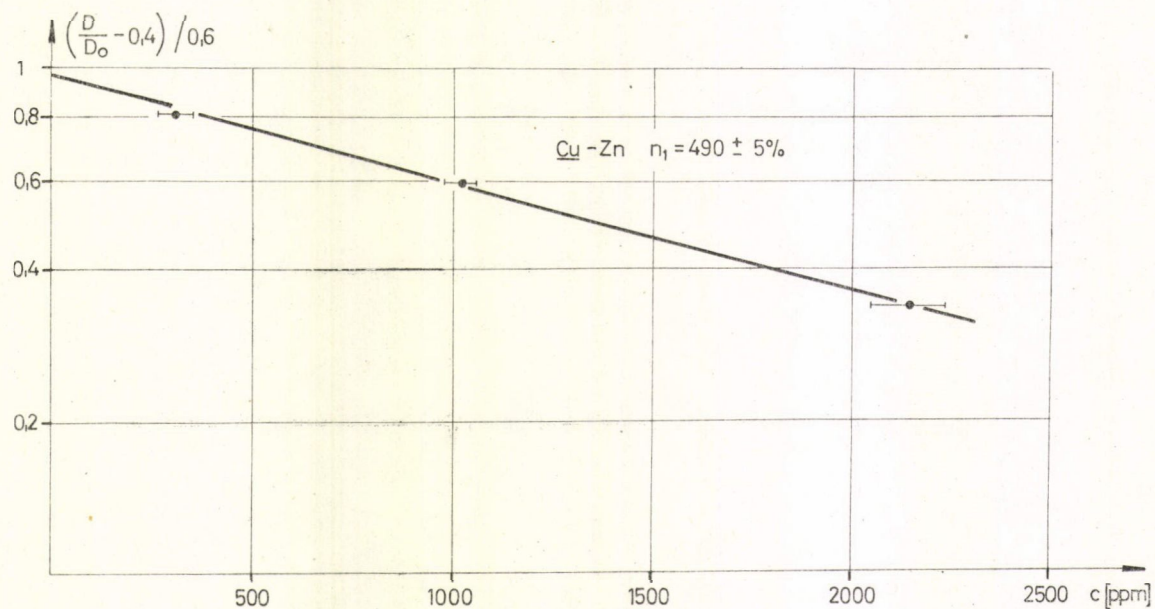
VI.B.a.3.-1. ábra

Az MMR spektrum amplitúdója Cu-Pd híg ötvözetben. A nyíllal jelölt ponthoz tartozó híg ötvözet az „átmeneti” tartományba esik, az amplitúdó értékét az első és másodrendű kvadrupól perturbáció eredménye határozza meg

A Cu—Zn ötvözeteken kapott eredményeket a VI.B.b.-1 ábra foglalja össze. A deriváltjel csúcsból csúcsig mért amplitúdója a tiszta réz spektrum elméleti szatellit-járulékára van normálva.

A hibahatáron belül a csúcsból csúcsig mért amplitúdó logaritmus a koncentrációnak lineáris függvénye, az iránytangens (kioltási szám) $n_1 = 490 \pm 5\%$.

A szélességek a VI.B.a.1-1 ábrán bemutatotthoz hasonlóan viselkednek, a csúcsból csúcsig mért szélesség gyakorlatilag nem változik.



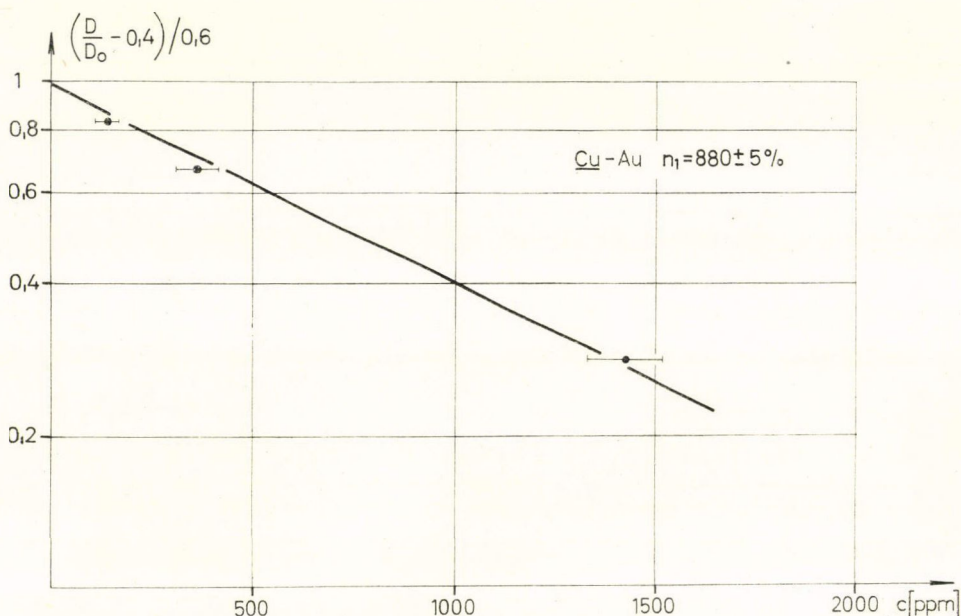
VI.B.b.-1. ábra
 ^{63}Cu MMR szatellit amplitúdó járulék a Zn koncentráció függvényében Cu-Zn híg ötvözetben. Elsőrendű
 kiszórási szám $n_1 = 490 \pm 5\%$

A másodrendű kvadrupól perturbáció tartományában (3...12 at% Zn tartalomnál) kapott kioltási szám $n_c=17$, tehát a Rowland [R, 5] által kapott számmal egyezik meg, az eltérés az általunk használt magasabb frekvenciának tulajdonítható.

A Cu—Au ötvözeteken az elsőrendű perturbáció tartományában kapott eredmények a VI.B.b.-2 ábrán láthatók. A kioltási szám $n_1 = 840 \pm 5\%$.

A szélességek hasonlóan viselkednek, mint a bemutatott esetben.

A centrális komponensre vonatkozó kioltási szám $n_c=44$ megegyezik a Rowland által publikálttal.



VI.B.b.-2. ábra

^{63}Cu MMR szatellit amplitúdó járulék az Au koncentráció függvényében Cu-Au híg ötvözetben. Elsőrendű kiszórási szám, $n_1 = 880 \pm 5\%$

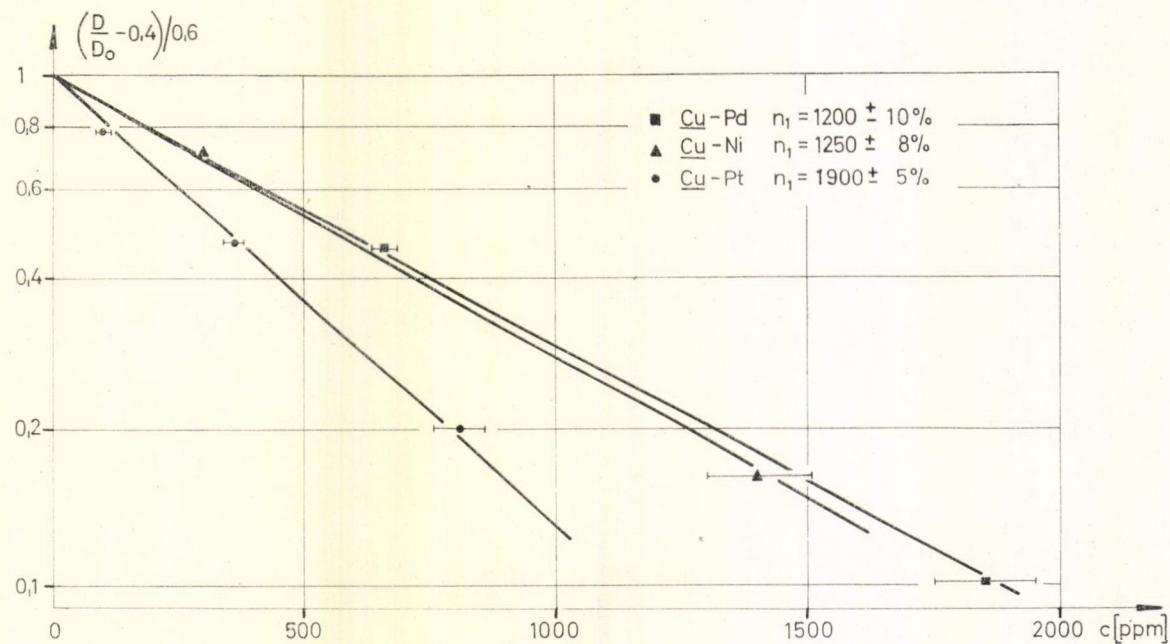
c) Átmeneti fém szennyezést tartalmazó híg ötvözetek

1. Nem mágneses szennyezés

A Cu—Ni, Cu—Pd és Cu—Pt híg ötvözeteken a derivált MMR-jel csúctól csúcsig mért amplitúdójának koncentráció-függését a VI.B.c.1-1 ábrán adtuk meg. Az elsőrendű kioltási számokat és a másodrendű kvadrupól perturbáció kioltási számait a III.B.c.1.-I táblázat tartalmazza. A másodrendű tartományban mért kioltási számok lényegesen eltérnek a Rowland—Shiotani által mért értékektől.

Az MMR-spektrum jellemzői a vizsgált hőmérséklettartományban (100...300 K°) hőmérsékletfüggést egyáltalán nem, mágneses tértől való függést csak a másodrendű kvadrupól perturbáció tartományában mutattak, az elméletnek megfelelően.

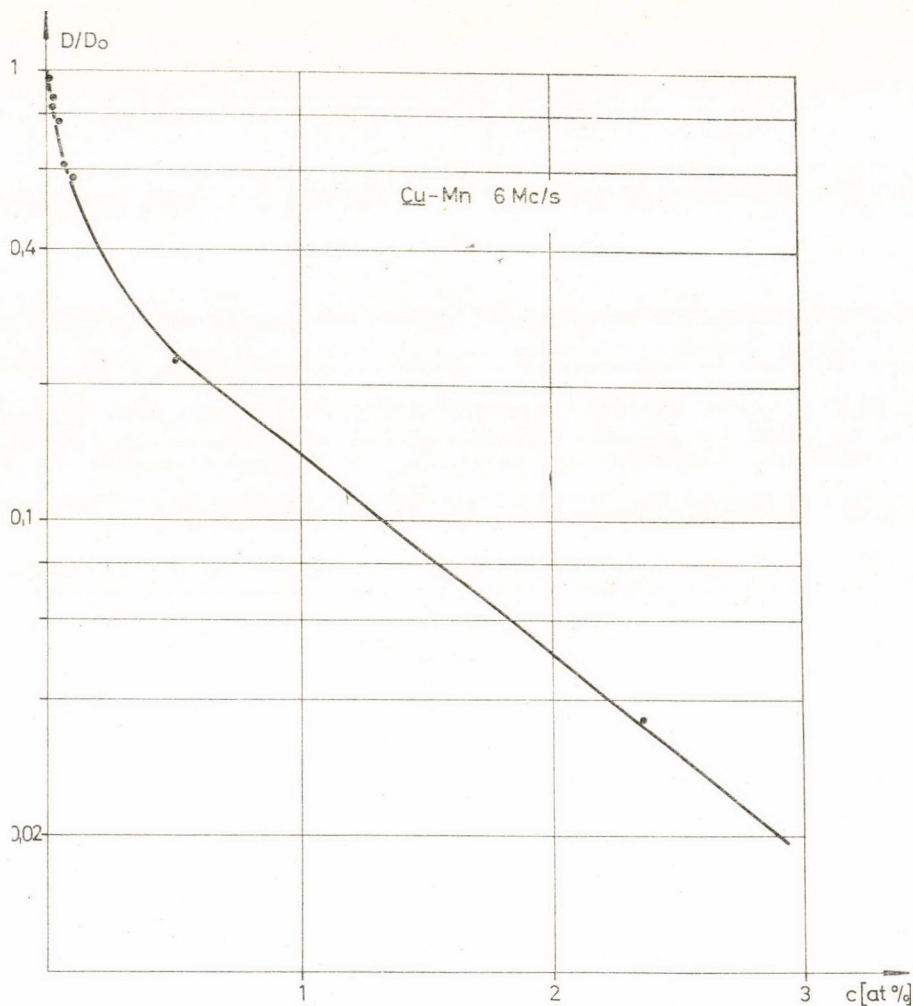
A Cu—Ni ötvözeteken végzett mérések viszonylagosan nagyobb mérési hibája az analízis bizonytalanságából származik.



VI.B.c.1.-1. ábra
 ^{63}Cu MMR szatellit amplitúdó járulék a második komponens koncentráció függvényében Cu-Ni ,
 Cu-Pd és Cu-Pt híg ötvözetekben

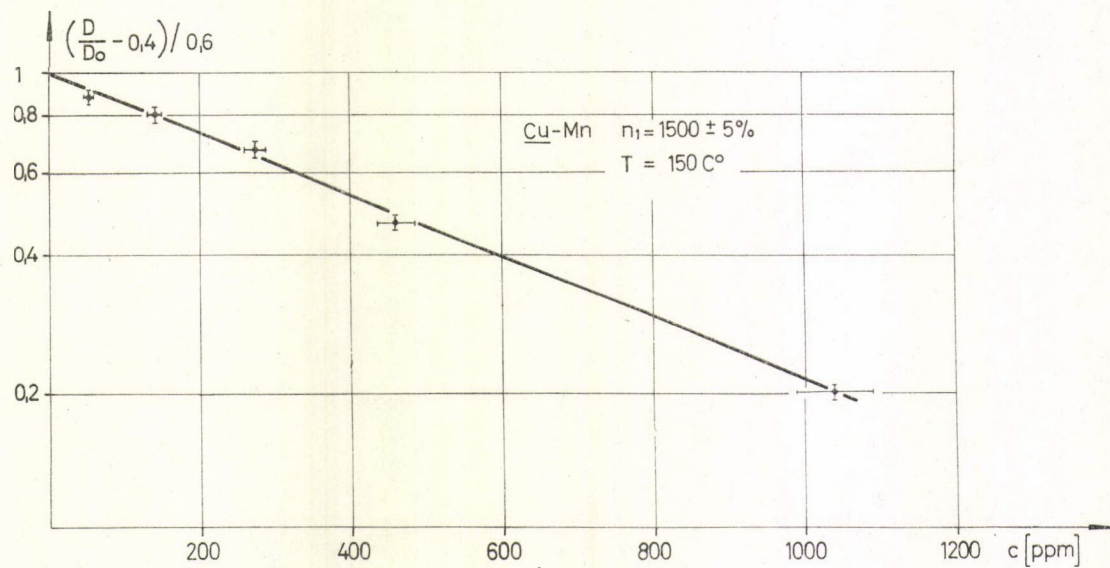
III.B.c.1.-I. táblázat ^{63}Cu MMR spektrum jellemzői Cu-Ni , Cu-Pd és Cu-Pt híg ötvözetekben

Ötv.	Menny.	n_1	n_c
Cu-Ni		$1250 \pm 10 \%$	24
Cu-Pd		$1200 \pm 8 \%$	33
Cu-Pt		$1900 \pm 5 \%$	44



VI.B.c.2.-I. ábra

^{63}Cu MMR jel amplitúdó a Mn koncentráció függvényében Cu-Mn híg ötvözetben 6 Mc/s frekvencián szobahőmérsékleten



VI.B.c.2.-2. ábra
A 150°C -on mért ^{63}Cu MMR jel szatellit amplitúdó járulék a Mn koncentráció függvényében
Cu-Mn hígötvözetben

2. Mágneses szennyezés

A Cu—Mn híg ötvözeteken végzett méréseink eredményei lényegesen eltérnek az összes többi ötvözetben végzett mérésektől; ezekhez csak annyiban hasonlítanak, hogy a koncentráció függvényében mért, csúcstól csúcsig vett amplitúdó az elején meredekebben változik, mint nagyobb koncentrációknál (III.B.c.2-1 ábra).

Ismeretesebb a Cu—Mn ötvözetben végzett jelszélesség- H/T mérések, melyekből a lokalizált momentum keltette spinsűrűség-oszcillációra következtek. Tekintettel arra, hogy a jelszélességek csak kis mértékben függenek a ponthiba okozta töltéssűrűség-oszcillációtól (lásd VI.B.a.1.-1 ábra), a töltéssűrűség-oszcilláció mérését itt is amplitúdómérésre volt célszerű visszavezetni. A csúcstól csúcsig mért amplitúdó növekvő H/T -vel csökken, a jelszélességgel ellentétesen; azonban kis szennyezésközpontnál (0...1000 ppm Mn) 10.000 Oe-ig terjedő mágneses terekben 150 °C-on és afölött H/T -től függetlenné válik.

A 150 °C hőmérsékleten mért amplitúdó hasonlóan viselkedik, mint a nem mágneses ötvözeteken. Az amplitúdó-központ görbe a II.B.c.2-2 ábrán látható, az elsőrendű kvadrupól-effektus *kioltási* számával együtt ($n_1 = 1500 \pm 75$).

A leglényegesebb eredmény az, hogy adott hőmérséklet fölött nem túlságosan magas térben az elsőrendű kvadrupól-effektus dominál, és így az aszimptotikus töltéssűrűség-oszcilláció jellemzői további feltételezések nélkül egyértelműen meghatározhatók.

Az ötvözetre vonatkozóan csak azokat a mérési eredményeket közöltük, amelyek a címben foglalt kérdésre adandó válasz megfogalmazásához szükségesek.

Összefoglalva a VI. fejezetet: a minták kiválasztásának indoklását, a minták elkészítését, összetételét és mérési eredményeinket tartalmazza. Leglényegesebb mérési eredményeinket, az elsőrendű kvadrupól-effektus kiszórási számait a VI. táblázatban foglaltuk össze, a meghatározáshoz használt minták második komponens tartalmával együtt.

VI. táblázat: elsőrendű kvadrupól-effektus (szatellit) kiszórási számai néhány Cu-alapú híg ötvözetben

Menny. Ötv.	Központ	n_1
Cu-Zn	310...2140 ppm	490 ± 25
Cu-Au	140...1400 ppm	840 ± 40
Cu-Ni	300...1200 ppm	1250 ± 125
Cu-Pd	660...1850 ppm	1200 ± 100
Cu-Pt	55... 810 ppm	1900 ± 100
Cu-Mn	52...1040 ppm	1500 ± 75

VII. Értékelés, következtetések

A fejezetben vázoljuk az irodalmi értékelési eljárásokat, ismertetjük az általunk használtakat. Az eljárások célja a mért spektrumból vagy annak egy jellemzőjéből a térgradiens, illetve a töltéssűrűség-oszcilláció jellemzőinek a meghatározása.

Értékeljük mérési eredményeinket, összevetjük az irodalomban található egyéb fizikai mennyiségek mérése alapján levont következtetésekkel, továbbá értékeljük eddigi eredményeinket, nem tévesztve szem elől, hogy pillanatnyilag nagyon kevés kísérleti adat áll rendelkezésre. Végül eredményeink egy gyakorlati következményére hívjuk fel a figyelmet.

A. Értékelési módszerek

Az értékelés során feltételezzük, hogy a térgradiens, illetve töltéssűrűség-oszcilláció az egyszerű Friedel-féle oszcillációval írható le.

Első közelítésben (ugyanis annak tekintjük jelenlegi értékelésünket) nem vesszük figyelembe:

- α a Sagalyn-féle méreteffektust, mert közvetlen mérésünk szerint $\lambda \leq 1,5$, és így a térgradiens egy tizede a Sagalyn és munkatársai által meghatározottnak, és közelítőleg 10%-a a Friedel-oszcillációból származónak;
- β a Beal Monod-, Kohn-féle, eltolt mátrixatomokon való elektronszórást, mindkét elhanyagolás a Cu—Au ötvözet esetében okozza a legnagyobb hibát;
- γ továbbá a III. A. b. pontban említett elméleti finomításokat.

Mindezek ellenére úgy gondoljuk, hogy az értékelés kevesebb hibát okoz az aszimptotikust jobban megközelítő, elsőrendben perturbált tartományban, mint a másodrendűben. Nem szabad azonban megfeledkezni arról, hogy az egyszerű értékelés nagyon sok elhanyagolásra épül és az említett jelenségek kvantitatív figyelembevétele — egyes esetekben az elméleti eredmények megszületése után — elengedhetetlen egy pontosabb értékelésben.

A töltéssűrűség-oszcilláció, azaz a térgradiens ismeretében, elsőrendű kvadrupól perturbációt feltételezve az MMR-spektrum elvileg meghatározható [R, 5]; adott szennyezéskonzentrációnál minden lehetséges mátrix — szennyezés konfigurációra meghatározva a járulékot, az eredő spektrum a konfiguráció előfordulási valószínűségével súlyozott komponensek összege. Gyakorlatilag ez a számolás keresztülvihető, ezért a spektrumszámolásban közelítéseket alkalmaznak. Rowland a lehetséges konfigurációkat két alaptípusba sorolta. Az I. típusban a térgradiens tengelyszimmetrikus (jellemzője q), és egyetlen szennyezés hozza létre. A II. típusú konfigurációban a térgradiens alacsonyabb szimmetriájú (jellemzői q és η), és több szennyezés együttes hatásának az eredménye. A nem tengelyszimmetrikus térgradiens MMR-spektrumra gyakorolt hatását részletesen tárgyalja Sztark és Sparo [S, 10]. A gyakorlatban a II. típusú konfigurációk spektrumjárulékát egyszerű négyszög alakú eloszlással helyettesítik.

Az értékelés legegyszerűbb módja a kísérleti és elméleti MMR-spektrum összehasonlítása helyett azok egyik, csak a kvadrupóleffektustól függő paraméterének (ha van ilyen!) az összehasonlítása. A kísérleti hibahatáron belül ilyen paraméternek tekinthető a derivált MMR-spektrum csúcstól csúsig mért amplitúdójának koncentrációfüggéséből meghatározható iránytangens vagy „kiszórási szám”.

(A teljes spektrum összehasonlítása a gyakorlatban kivihető, mert a háttér (zaj) miatt a spektrum egy része áll csak rendelkezésre.)

A „kiszórási szám” lineáris közelítésben egy szennyezésre vonatkozó azon mátrixmagok száma, amelyek nem adnak járulékot a derivált jel csúcstól csúsig mért amplitúdójához. Általában a $D = D_0(1 - c)^n$ összefüggéssel definiálhatjuk (D az ötvözetben, D_0 a tiszta mátrixon mért amplitúdó, c koncentráció), az összefüggés em-

pirikus és ettől eltérő viselkedést még senki sem tapasztalt, a bekezdés lineáris közelítése az összefüggés soralakban felírt alakjának első tagja, kis n és kis koncentráció esetén igaz.

Feltételezésünk szerint a több mint egy szennyezés által perturbált magok MMR-spektrumra gyakorolt hatása viszonylag kis szennyezés-koncentrációk esetén, tehát az elsőrendű tartományban elhanyagolható, ami természetesen elvben végtelen hígítás esetén igaz, gyakorlatban annál jobb közelítés, minél kisebb a koncentráció és a kiszórási szám (azaz a töltéssűrűség-oszcilláció amplitúdója).

Végtelen hígítás esetén két értékelési eljárást használtunk és ismertetünk az $n_1 \leftrightarrow q$ hozzárendelés meghatározására.

a) *All-or-nothing modell* [K, 4]

A modell szerint egyes magok teljes mértékben, mások egyáltalán nem járulnak hozzá a csúctól csúcsig mért amplitúdóhoz; pontosabban a (relatív egységekben mért) q_r térgradienst érző atommag (mátrix) „kiszórási számhoz” való hozzájárulásának a mértéke $w(q_r) \equiv 0$ ha $q_r < q_{\text{krit.}r}$ és $w(q_r) \equiv 1$, ha $q_r \geq q_{\text{krit.}r}$. Az eljárás egyszerű; össze kell adnunk azoknak a mátrixmagoknak a számát, amelyek $q_{\text{krit.}r}$ -nél nagyobb térgradienst éreznek, és megkapjuk a kiszórási számot. Az eredmény láthatóan az önkényesen választott $q_{\text{krit.}r}$ -től függ, a választás helyességét csak több ötvözetten kapott azonos eredmény igazolhatja.

A konkrét értékeléshez $I = 3/2$ spinű és lapcentrált köbös rácsra számítógéppel

$$n_1 = n_1 \left\{ \frac{8\pi}{3} \alpha \frac{A}{a_0^3} q_{\text{krit.}}^{-1}, \varphi \right\}$$

függvénytáblázatot készítettünk a térgradiens-jellemzők A , α , φ és n_1 közti összefüggés meghatározásához.

b) *Sagalyin és mtsai* [S, 1] módszere

Az önkényes q_{krit} paramétertől megszabadulhatunk, ha a reális fizikai képből kiindulva, Sagalyin és munkatársai által a másodrendű kvadrupól perturbáció tartományában alkalmazott módszert az elsőrendű tartományba ültetjük át.

Figyelembe véve a kvadrupól kölcsönhatás szögfüggését és az MMR-spektrum dipól-dipól kiszélesedését, a q_r a dimenziótlan egységekben mért térgradienst érző atommag hozzájárulása a kiszórási számhoz.

$$w(q_r) = 1 - \int_0^\infty p_{q_r}(v) f(v - v_0) dv,$$

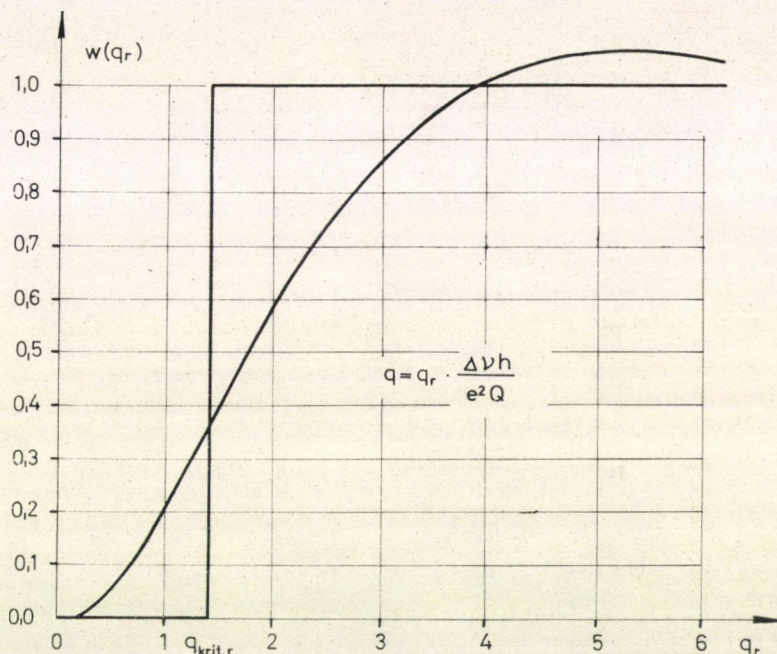
ahol $p_{q_r}(v)$ a polikristályos minta elsőrendű kvadrupól kölcsönhatásból származó derivált spektruma [C, 3], $f(v - v_0)$ a dipól-dipól kölcsönhatás által meghatározott spektrum (az abszorpció jel frekvencia szerinti deriváltja, konkrét számolásnál a a tiszta réz kísérleti spektruma, vagy azonos szélességű derivált Gauss-görbe; a kétféleképpen számolt eredmény alig különbözik), v_0 a derivált spektrum szélső-értékéhez tartozó frekvencia. A $w(q_r)$ függvény meghatározása ICT 1900-as számítógéppel történt, biztosítva az $f(v_0) \equiv 1$ és az $\int_0^\infty p_{q_r}(v) dv = 1$ normálási feltételeket.

A számolt $w(q_r)$ görbét és összehasonlításul az all-or-nothing modell megfelelő görbét a VII.A.b.-1. ábrán tüntettük fel.

A kiszórási szám:

$$n_1 = \sum_{i=1}^{N_1} w(q_{ri}) \tilde{n}_i$$

ahol \tilde{n}_i az i koordinációs héjon levő mátrixmagok száma, és az összegezést számítógéppel 400 koordinációs héjra végeztük el lapcentrált köbös rácsra.*



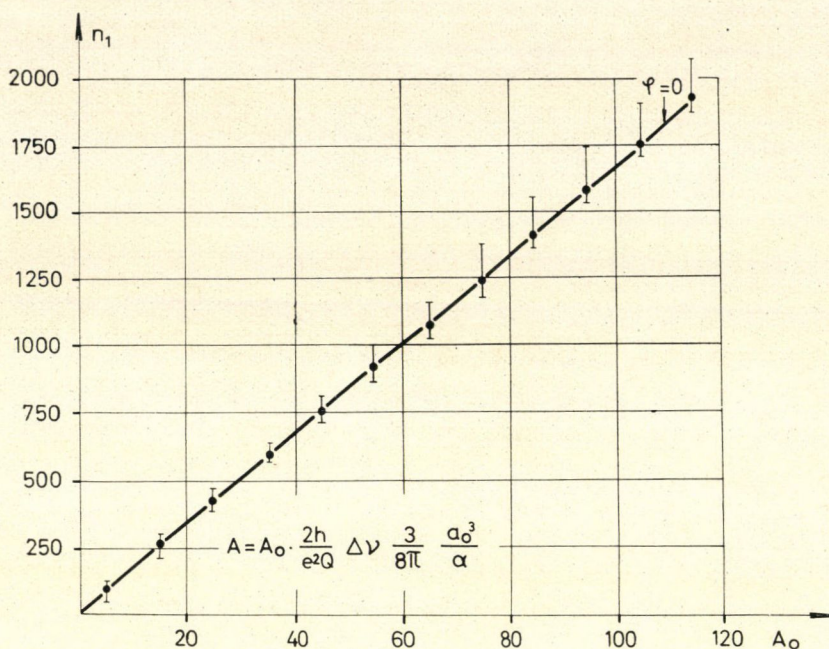
VII.A.b.-1. ábra

Hozzájárulás a kiszórási számhoz a Sagalyn-módszerben és az „all-or-nothing” modellben $I = 3/2$ magspin és elsőrendű kvadrupól perturbáció esetén

A kapott eredmény $n_1(\alpha A, \varphi)$ meghatározására táblázat áll rendelkezésre. A táblázat szerint nagyobb n_1 -eknél ($n_1 \sim 1000$) n_1 már alig függ φ -tól, $0 \leq \varphi \leq 180^\circ$ -ra a változás 15%-on belül van. Ezt az eredményt grafikusán is megadtuk a VII.A.b.-2. ábrán. A kihúzott, $\varphi = 0^\circ$ -hoz tartozó görbe, az $n_1 = n_1(\alpha A)$ összefüggés meghatározásában (15%-on belül!) tájékozódásra felhasználható. Ezt használtuk mi is, amikor nem állt rendelkezésre kielégítő $\alpha A, \varphi$ pár a mérési eredmények értelmezésére; a mért n_1 -ből meghatároztuk a $\varphi = 0$ -hoz tartozó αA -t, a térgradiens amplitúdóját, ami közérthetőbb mennyiség, mint a kiszórási szám.

Az ismertetett módszerek alapján értékeltük mérési eredményeinket.

* A VII.A. pontban ismertetett értékelési feladatok számítógépes megoldásáért Jánossy András tud. munkatársnak mond köszönetet a szerző.



VII.A.b.-2. ábra

Kiszórási szám térgradiens összefüggés, $I=3/2$ magspin, lapcentrált köbös rács és elsőrendű kvadrupól perturbáció esetén. A kihúzott görbe a $\Phi=0^\circ$ -hoz tartozó $n_1(A_0)$, az egyes pontokhoz berajzolt intervallumok mutatják a Φ -től való függést

B. A mérési eredmények értékelése

Az értékelésben a modellanyagok kiválasztásának szempontjait szem előtt tartva, az egyszerűbbtől a bonyolultabb híg ötvözetek felé haladunk. Technikailag — α -t ismertnek tételezve fel — a mért kiszórási számot az elméleti A és φ alapján a b. értékelési módszer szerint számolttal hasonlítjuk össze. Ahol nem áll rendelkezésre kielégítő egyezést adó elméleti (vagy félempirikus) A és φ , ott a mért n_1 mellett az abból meghatározható $\varphi=0$ -hoz tartozó α A -t (illetve α ismeretében A -t, a töltéssűrűség-oszcilláció amplitúdóját) is megadjuk, amint erről már az előbbi fejezetben szóltunk.

Az „all-or-nothing” modell inkább hagyománytiszteletből került az értékelési módszerek közé (más szerzők előszeretettel alkalmazzák egyszerűsége miatt); a kísérleti n_1 -gyel a b. értékelés szerint legjobb egyezést adó $(\alpha A, \varphi)$ -re meghatározzuk a q_{krit} értékét és összehasonlítjuk modellanyagainkon.

Az egyes ötvözeteknél a konkrét összehasonlítást a könnyebb áttekinthetőség kedvéért táblázatok alakjában adjuk meg, felsorolva az irodalmi, egyéb fizikai mennyiségekre vonatkozó eredményeket is. Ami a másodrendű kvadrupóleffektust illeti, a táblázatok a Friedel-oszcilláció alapján történt irodalmi kiértékelést tartalmazza a *Sagalyin és mtsai* [S, 1]-féle „méret”-effektusról a szövegben tettünk említést (IV. fejezet).

a) *Nem-átmeneti fém szennyezést tartalmazó híg ötvözetek*1. *Cu—Zn híg ötvözet*

Az eredményeket a VII.B.a-I táblázat tartalmazza. Az elsőrendű kvadrupól-effektus kiszórási számát illetően az egyezés az Alfred—Van Ostenburg-féle fázis-eltolódások alapján számolttal a legjobb. Az all-or-nothing modell alapján ezekre a fáziseltolódásokra számolt $q_{krit} = 1 \cdot 8 \cdot 10^{21} \text{ cm}^{-3}$ fizikailag egyáltalán nem irreális. Külön meg szeretnénk említeni az eredmény elfogadható egyezését a Langer—Vosko-féle eredménnyel. A maradék (szennyezési) ellenállásról nincs sok mondani-valónk, mert három fáziseltolódás is per-definícióm kielégíti, a Blatt-félében durván kettes faktoreltérés van a mérttől, az elsőrendű kvadrupóleffektusban pedig 1/2. Ami a folyadékokon (olvadék) mért Knight-eltolódást illeti, a Kohn—Vosko-féle ugyanúgy felülbecsüli ezt is, mint az elsőrendű kvadrupóleffektust.*

Így a másodrendű kvadrupóleffektus tartományban alkalmazott, megfelelő faktorral szorzott Kohn—Vosko-féle eredmény (nem is beszélve a Sagalyn-féle megfelelő méreteffektus hozzáadásáról) messze felülbecsüli az elsőrendű tartományban kapott eredményt.

2. *Cu—Au híg ötvözet*

Az eredmények a VII.B.a-II táblázatban találhatók. Jó egyezést ad a Kohn—Vosko és a Roberts és mtsai féle (Blatt-korrektcióval módosított Kohn—Vosko) eredmény, ami azért meglepő, mert Cu—Zn esetén a Kohn—Vosko-féle eredmény ~70%-kal volt nagyobb a mértnél. A pszeudóatom fáziseltolódások jó előjelet adnak az olvadék Knight-eltolódására, ugyanakkor túl kis értékeket a szennyezési ellenállásra és az elsőrendű kvadrupóleffektus „kiszórási” számára. Ebből arra lehet következtetni, hogy az eltolt mátrixatomokon való szórásnak nagyobb szerepe van és a kiértékelésnél figyelembe kell venni. A másik három fáziseltolódás-rendszer rossz előjelet ad az olvadék Knight-eltolódás változására. A Roberts-féle fáziseltolódások alapján és a mért n_1 alapján számolt q_{krit} néhány százalékon belül egyezik a Cu—Zn-en kapottal. (Ami bizonyítja, hogy a két értékelési rendszer belső ellentmondást nem tartalmaz.)

b) *Átmeneti fém szennyezést tartalmazó híg ötvözetek*1. *Nem mágneses szennyezés*

A Cu—Ni, Cu—Pd és Cu—Pt rendszereken kapott kísérleti eredmények értelmezésénél eltérünk a Cu—Zn és Cu—Au esetén alkalmazott gyakorlattól, tekintettel a rendelkezésre álló fáziseltolódások kis választékára és eredetére.

Első lépésben tételezzük fel, hogy a mért térgradiens (töltéssűrűség-oszcilláció) kizárólag az $l=2$ -es rezonanciaszórásból származik. Ekkor a (II,6) összefüggés és a VII.A.b. értékelési eljárás alapján mért kiszórási számokból az alábbi fáziseltolódások adódnak: Cu—Ni $|\eta_2| = 10^\circ 5'$; Cu—Pd $|\eta_2| = 9^\circ 55'$; Cu—Pt $|\eta_2| = 15^\circ 30'$. A fáziseltolódások a (II,6) összefüggés alapján rendre a 3d, 4d, 5d virtuális nívón 0,54; 0,50; 0,86 lyuknak felelnek meg. Az eredmény nagyon szépen egyezik azzal a klasszi-

* Legjobb egyezést az Alfred—Van Ostenburg-féle fáziseltolódások alapján számolttal kapunk.

VII. B. a-I. táblázat: Cu-Zn híg ötvözetben kapott eredmények

Jellemző	Módszer	Fáziseltolódás					Kvadrupoleffektus				Szennyezési ellenállás $\mu\text{ohm. cm/at \%}$	Knight- eltolódás $-\frac{1}{k} \frac{\partial k}{\partial c}$
		η_0	η_1	η_2	η_3	η_4	αA	Φ	n_1	n_c		
Elméleti eredmény	Langer— Vosko	—	—	—	—	—	0,60	180°	~ 680	—	—	—
	Blatt	0,5313	0,2410	0,0277	0,0018	—	0,19	-37°	~ 210	—	0,66	0,020
	Kohn— Vosko	0,521	0,35	—	—	—	0,71	$11,1^\circ$	~ 800	24	*	0,273
	Hurd— Gordon	0,33078	0,24815	0,05438	0,00579	0,00039	0,23	$19,3^\circ$	~ 270	—	*	0,077**
	Alfred— Van Ostenb.	0,203	0,254	0,059	0,014	0,004	0,42	$23,25^\circ$	490	—	*	0,139
Mért mennyiségek									490	18	0,335	0,19

* A félempirikus fáziseltolódás-meghatározási módszer felhasznált mennyisége, definíciószerűen azonos a mért mennyiséggel.

** A Hurd—Gordon [H, 4] által számolt érték hibás, mert a lapcentrált köbös rácra vonatkozó A_i , B_i állandókkal [B, 9] számolt az olvadáskra vonatkozók helyett [0, 1].

VII. B. a.-II. táblázat: Cu-Au híg ötvözetben kapott eredmények

Jellemző	Módszer	Fáziseltolódás					Kvadrupóleffektus				Szennyezési ellenállás $\mu\text{ohm cm/at \%}$	Knight- eltolódás $-\frac{1}{k} \frac{\partial k}{\partial c}$
		η_0	η_1	η_2	η_3	η_4	αA	Φ	n_1	n_c		
Elméleti eredmény	Pszeudó- atom	-0,067	0,054	0,025	-0,005	—	-0,18	$0,5^\circ$	~ 200	—	0,11	0,013
	Kohn— Vosko	0,275	-0,092	—	—	—	0,69	$-9,9^\circ$	~ 780	24	*	-0,249
	Roberts és mtsai	0,0562	-0,1951	—	—	—	0,77	$-26,1^\circ$	860	—	*	-0,312
	Alfred— Van Ostenb.	-0,411	-0,020	-0,005	-0,001	—	0,48	$5,2^\circ$	~ 550	—	*	-0,053
Mért mennyiségek									880	44	0,52	0,07

* A félempirikus fáziseltolódás-meghatározási módszer felhasznált mennyisége, definíciószerűen azonos a mért mennyiséggel.

kus tapasztalattal [I, 1], [G, 1], hogy az ötvözetekben az átmeneti fématom d sávjában lyuk van, $Cu-Ni$ -re a 0,6 szám közismert. Az eredmény jól egyezik az olvadék-Knight-eltolódására mért eredménnyel [G, 1], és ellentmond annak a sztatikus elképzelésnek, hogy pl. 60% Cu tartalomnál a $Cu-Ni$ ötvözet mágnessége azért tűnik el, mert a Cu s elektronjai betöltik a Ni -n lokalizált lyukakat, alátámasztva így módon egy — a sztatikustól eltérő — interpretáció szükségességét [R, 3]. A csak rezonanciaszórás-feltételezés alapján számolt szennyezési ellenállásjárulékok közelítőleg felét adják a mért értéknek (IV. táblázat). Azok számára, akik szeretnek a kísérleti adatokból olvasni, megemlítjük, hogy a $Cu-Zn$ van és $Cu-Ni$ -ben (a szennyezés a réz jobb és bal oldali szomszédja a periódusos rendszerben), illetve a $Cu-Au$ -ban és $Cu-Pt$ -ban (a szennyezések szomszédok) az elsőrendű kiszórási számok 490:1250, ill. 840:1900 önmagukban is nagyon szépen bizonyítják a virtuális állapot létét az átmeneti fém szennyezések esetén, míg mindez majdnem teljesen rejtve marad a másodrendű effektus vizsgálata után (18:19, illetve 44:60).

Második lépésként összehasonlítjuk a mért kiszórási számokat a *Beal Monod* [B, 3] féle fáziseltolódások alapján számoltakkal, nem feledve, hogy a másodrendű kvadrupóleffektus kiszórási számait kísérleti alapul felhasználva az aszimptotika érvényessége $Cu-Pt$ -ből $Cu-Ni$ felé haladva feltehetően csökken, továbbá, hogy eltérő adatok találhatók az irodalomban a másodrendű kiszórási számokat illetően (IV. fejezet). Az eredményt a VII.B.b-I. táblázat tartalmazza.

A VII.B.b-I. táblázathoz annyit kívánunk hozzáfűzni, hogy $Cu-Pd$ és $Cu-Pt$ esetén a másodrendű kvadrupól adatokra támaszkodó elmélet ugyanúgy felülbecsli az elsőrendű méréseket, mint $Cu-Zn$ és $Cu-Au$ esetén, ettől a tendenciától csak a $Cu-Ni$ esetén van eltérés.

VII.B.b-I. táblázat: A Beal Monod-féle fáziseltolódások alapján számolt és mért elsőrendű kvadrupól kiszórási számok $Cu-Ni$, $Cu-Pd$ és $Cu-Pt$ híg ötvözeteken

Anyag	Elméleti						Kísérleti kiszórási szám
	Fáziseltolódás			Ampl.	Fázis	Kiszórási sz.	
	η_0	η_1	η_1	αA	Φ	η_1	
$Cu-Ni$	0,190	-0,127	-0,260	0,95	-25°04'	1050	1250 ± 8 %
$Cu-Pd$	-0,293	-0,120	-0,243	1,43	-16°53'	1600	1200 ± 10 %
$Cu-Pt$	-0,298	-0,008	-0,315	2,30	-18°08'	2600	1900 ± 5 %

A harmadik lépés egy Beal Monodéhoz hasonló értékelés az elsőrendű kvadrupól adatokra támaszkodva.

Tehát a félempirikus fáziseltolódási módszer kiinduló mennyiségei a módosított Friedel-féle összegszabály (III, 4), a szennyezési ellenállás (III,15) és (Beal Monod-tól eltérően) az elsőrendű kvadrupól effektus kioltási száma. Beal Monodhoz képest további lényeges eltérést jelent, hogy az elektromos térgradiens és a kioltási szám közti kapcsolatot nem az „all-or-nothing” modell alapján, hanem a VII.A.b. pontban leírt módszer szerint határoztuk meg. A Jánossy A. [J, 1] által elvégzett gépi számítás menete egyébként hasonló a Beal Monod által leírthoz. Az egyenletrendszert több megoldáshármas (η_0 , η_1 , η_2) is kielégítheti, közülük $Cu-Pd$ -re és $Cu-Pt$ -ra

két, $Cu-Ni$ -re pedig egy olyan van, amelyben az η_2 megközelíti a $\pi/10$ -es értéket, tehát a szennyezés lokalizált virtuálisan kötött d -állapotot ír le.

A kapott rezonanciaszórást mutató eredményeket a VII.B.b-II. táblázatban foglaltuk össze.

VII.B.b.-II. táblázat: Elsőrendű kvadrupól effektusból számolt Beal Monod [B, 3]-féle félempirikus fáziseltolódások

Fáziseltolódás Ötvözet	η_0	η_1	η_2
$Cu-Ni$	0,221	-0,109	-0,276
$Cu-Pd$	-0,046 -0,570	-0,171 -0,164	-0,262 -0,171
$Cu-Pt$	0,168 0,792	-0,096 -0,072	-0,349 -0,188

Megnyugtatóul szeretnénk közölni, hogy a $Cu-Zn$ ötvözetre vonatkozó hasonló értékelés nem adott rezonáns η_2 -t tartalmazó megoldást.

Összefoglalóan a $Cu-Ni$, $Cu-Pd$, $Cu-Pt$ sorra kapott eredményeinket mindhárom megoldásból virtuálisan kötött, a szennyezésen lokalizált d állapotra lehet következtetni. A VII.B.b.-II. táblázat fáziseltolódásai közül nem tudunk választani, annak ellenére, hogy lényegesen eltérő elektronszerkezetre utalnak ($Cu-Pd$ és $Cu-Pt$ két megoldása). További kísérleti adatok, pl. az olvadákokon mérhető Knighteltolódás talán közelebb visznek majd a kérdés tisztázásához.

Az „*all-or-nothing*” modell és a VII.B.b.-II. táblázat fáziseltolódásai alapján számolt q_{krit} érték néhány százalékon belül egyezik a $Cu-Zn$ -en kapottal.

2. Mágneses szennyezés

Az értékelést a (III,8) összefüggés és a *Daniel* [D, 1] által a szennyezési ellenállás értelmezésénél felhasznált fáziseltolódások alapján végeztük. Az $\eta_2 = \pi$ és

$$\eta_2 = \frac{\pi}{5} \cdot 0,7 = 0,44 \text{ fáziseltolódások alapján számolt [D, 1] szennyezési ellenállás,}$$

$\Delta\rho = 2,5 \mu\text{ohm} \cdot \text{cm/at}\%$ jól egyezik a méréssel, $\Delta\rho = 2,8 \dots 3 \mu\text{ohm} \cdot \text{cm/at}\%$. Így a töltéssűrűség-oszcilláció csak a spin- le elektronoktól származik. A VII.A.b. alapján ($\alpha = 25$ növekedési faktor) számolt kiszórási szám $\eta_1 = 1420$, elfogadható egyezésben van az 1500 ± 75 -ös mért értékkel. A mért kiszórási számnak az $A = 5,29 \cdot 10^{-2}$ töltéssűrűség-oszcilláció amplitúdó felel meg.

A *Hurd* [H, 5] által javasolt elektronszerkezetből $n_1 = 1840$ kiszórási szám következik, ez az elektronszerkezet — különösen ami a $4s-4p$ elektronok számát illeti — lényegesen eltér a [G, 1] által megadottól.

A Lumpkin által adott 6-os effektív valencia és a $Cu-Zn$ -en mért elsőrendű kiszórási szám alapján becsült $Cu-Mn$ elsőrendű kvadrupól kiszórási szám, $n_1 \sim 3000$, ami még a már megismert másodrendű effektus nagyságának az elsőrendű tartományra való átvételéből származó túlbecslésekhez képest is túlságosan magasnak tűnik.

Ugyanakkor a $Cu-Mn$ és $Cu-Ni$ -re vonatkozó rétegeződési hiba előfordulási valószínűség és energia közeli azonossága alapján [M, 1], [N, 1] a szóró potenciál csaknem azonos erősségű a két szennyezésre, amint azt elsőrendű kvadrupól kiszórási számaink is mutatják, ellentétben a 4 Mc/s-ra vonatkozó másodrendű kvadrupól kiszórási számokkal $Cu-Ni$ -re $n_c = 19$ és $Cu-Mn$ -ra $n_c = 114$.

c) Egy metallográfiai következmény

Mielőtt összefoglalnánk mérési eredményeinket, azoknak egy gyakorlati következményére szeretnénk felhívni a figyelmet. Elvileg azonnal belátható, és pl. a $Cu-Pt$ mérési eredményeket bemutató VI.B.a.2-1. ábra alapján gyakorlatban is — figyelembe véve az MMR-amplitúdómérés egy százaléknál jobb mérési pontosságát —, hogy a módszer ~ 10 ppm szennyezés detektálására alkalmas. Nagyobb perturbációt okozó szennyezésre az érzékenység természetesen javul.

A gyakorlati következmény tehát az, hogy a szennyezési ellenálláshoz hasonlóan az MMR-jel amplitúdójának csökkenése az anyagminta össz-szennyezettségének a mértékéül szolgál. Az amplitúdó-csökkenésből a szennyezettség pl. Zn ekvivalens koncentrációban fejezhető ki.

Elvileg összehasonlítva a két módszert az MMR hátránya a kisebb pontosság és érzékenység, maga a mérőberendezés pedig lényegesen bonyolultabb; nagy előnye, hogy a mérések szobahőmérsékleten végezhetők, szemben az ellenállásmérés mélyhőmérséklet-igényével.

C. Összefoglalás. Következtetések

Eredeti tervünknek megfelelően az egyszerű potenciálszórásnak (eltérő és azonos valenciájú szennyezésén) és virtuálisan kötött nem mágneses ($3d$, $4d$, $5d$ átmeneti fém-szennyezés, „nem mágneses üzem”) és mágneses ($Cu-Mn$, „mágneses üzem”) elektronállapotoknak a szennyezés körüli aszimptotikus töltéssűrűség-oszcillációra gyakorolt hatását tanulmányoztuk a réz alapú híg ötvözetekben, a mások által nem vizsgált elsőrendű kvadrupóleffektus mérése alapján.

Eredményeink közül kiemelkedők a több szempontból modellnek tekinthető $Cu-Zn$ és $Cu-Ni$ híg ötvözeteken kapott eredmények, a $Cu-Mn$ híg ötvözetben a lokalizált momentum körüli töltéssűrűség-oszcilláció amplitúdójának megnyugtató meghatározása és a másodrendű tartományban oly sok félreértést adó „ λ -probléma” adott szintű tisztázása, azaz a λ -paraméter értelmezése és az α -növekedési faktor felső határainak meghatározása. Ami a másodrendű kvadrupól perturbáció tartományába eső mérésekkel való összehasonlítást illeti, egyértelműnek látszik, hogy az aszimptotikust jobban megközelítő elsőrendű tartományban kisebb az oszcilláció amplitúdója, mint ahogy a másodrendű kioltási számok alapján számolható. Az elmentmondás triviális feloldása az, hogy a szennyezés közvetlen környezetében a preaszimptotikus elméleti összefüggések írják le a töltéssűrűség-oszcillációt, és azok szerint kell értékelni; továbbá feltehető, hogy a rácsdeformáció is nagyobb ott, mint a röntgendiffrakcióval meghatározott átlag [F, 6].

Nem kívánunk nagyon messzire menni a következtetésekkel, mert túlságosan széles a terület és pillanatnyilag kevés a mérési adat a minden részletre kiterjedő elemzéshez. (Reméljük, hogy ezután már az elsőrendű kvadrupól effektus-mérések is lényeges információ forrásául szolgálnak!) A magunk részéről most megelégszünk

az értékelés során az egyes konkrét ötvözetekkel kapcsolatban elmondottakkal. A végleges megoldás természetesen az összes mérhető mennyiséget (így az elsőrendű kvadrupól-effektust is!) tartalmazó, a Faber—Ziman diagramra épülő elemzés, amelyik alapján az összes mért mennyiségeket leíró fáziseltolódás-rendszert (ha van egyáltalán ilyen) valószínűsíteni lehet. Fontos továbbá annak az eldöntése is, hogy a kvantitatív értelmezés az alkalmazott közelítéseken túlmenően mennyi elméleti finomítást követel meg. Az első könnyebb, a második lényegesen nehezebb feladat.

VIII. Hogyan tovább? Új kísérletek

A VIII. fejezetben olyan további kísérletek tervét vázoljuk, amelyek jelen eredményeink, irodalmi eredmények, a korábban általunk bevezetett kockatextúrás anyagmintáknak ezen a területen történő alkalmazása, vagy új mérés technika alkalmazása alapján reálisak, és előreláthatóan közelebb visznek a kérdések tisztázásához.

Nem túlságosan részletezve és néhány főbb kérdés köré csoportosítva ismertetjük ezeket a vizsgálatokat. Mindjárt az elején szeretnénk kizárni a kérdés felvetésének azt a triviális módját, hogy a periódusos rendszert magunk elé téve, az összes eddig nem vizsgált két, majd később a háromkomponensű réz alapú híg ötvözet vizsgálatát tervezzük. Azonban úgy tűnik, hogy a megkezdett úton tovább kell mennünk ahhoz, hogy a mérési eredmények értelmezésében egyértelmű következtetésre juthassunk.

A mátrixszal azonos vegyértékű szennyezők hatásának a vizsgálatához a következő modell a $Cu—Ag$ híg ötvözet. Szemben az Au jó oldhatóságával, itt precipitáció nehezíti meg a feladat megoldását.

Az eltérő vegyértékű szennyezők Zn -kel megkezdett sorát Ga -mal és Ge -mal kívánjuk kiegészíteni.

Az átmeneti fém szennyezést tartalmazó híg ötvözetek sora számtalan lehetőséget tartalmaz; sokat közülük ($Cu—4d$, $Cu—5d$, $Cu—4f$ stb.) jóformán alig vizsgáltak, és várhatóan szisztematikus vizsgálatuk sok új érdekességet nyújt majd.

A $3d$ -átmeneti fém szennyezést tartalmazó réz alapú híg ötvözetek vizsgálatára a közeljövőben nagyobb figyelmet kívánunk fordítani. Azon túlmenően, hogy a töltéssűrűség-oszcillációból a szennyezés elektronszerkezetére következtethetünk, várható az, hogy az elektronszerkezet változása is nyomon követhető a töltéssűrűség-oszcilláció mérésével, feltéve, hogy más effektus a töltéssűrűség-oszcilláció változását el nem fedi. A lokalizált mágneses momentum felléptével kapcsolatos kérdéskör (Kondo-effektus, III. fejezet) tanulmányozása látszik a legfontosabbnak. A spinsűrűség-oszcilláció ellenőrzésére is módot nyújt a $\Delta n^{\uparrow}(r) + \Delta n^{\downarrow}(r)$ -rel egyenlő töltéssűrűség-oszcilláció meghatározása.

A $3d$ átmeneti fémek közül a vasszennyezés elektronstruktúrájának és makroszkopikus mennyiségekre gyakorolt hatásának a megismerése ipari szempontból sem haszontalan, számos ipari réz termék nem kívánatos vasszennyezést tartalmaz.

Részletesebben kívánunk szólni a vakanciák MMR módszerrel történő vizsgálatának a lehetőségéről.

Az elsőrendű kvadrupóleffektus részletes tanulmányozása, a kapott numerikus eredmények alapján a vakanciák mikrofizikai módszerrel történő tanulmányozásának lehetősége elérhető távolságba került. A vakancia körüli hosszútávú vezetési

VIII.I. táblázat: Egyszeres réz vakancián szórt vezetési elektronok fáziseltolódásai a Fermi-energiával

Módsz. \ Fáziseltol.	η_0	η_1	η_2	η_3
Pszudopot.*	-0,601	0,325	-0,003	0,001
Stehle	-0,849	-0,183	-0,0302	-0,0026

* $k_F = 0,7$ -re vett értékek.

elektronsűrűség-oszcilláció éppúgy kimérhető az elsőrendű kvadrupóleffektus felhasználásával, mint a bevitt szennyezések körüli. A következőkben becslést kívánunk adni az egyetlen vakancia által keltett effektus nagyságáról, meghatározva, illetve felhasználva az egyéb célra meghatározott töltéssűrűség-oszcilláció amplitúdójának és fázisának az értékét, illetve annak alapján az elsőrendű kvadrupóleffektus kioltási számát, továbbá a rendelkezésünkre álló vakanciakoncentráció-adatok [S, 8] alapján az MMR jel várható amplitúdó-csökkenését.

A vakanciaproblémával kapcsolatban Seeger A. [F, 4] összefoglaló cikkére utalunk. A becsléshez a pszudopotenciál-elmélet [M, 3] és a Stehle [F, 4]-potenciál alapján számolható fáziseltolódásokat használjuk fel, amelyek kielégítik a Friedel-féle összesszabályt, és értékeiket a VIII.I. táblázat tartalmazza.

A megadott fáziseltolódások alapján kiszámoltuk a töltéssűrűség-oszcilláció amplitúdójának és fázisának az értékét, az elsőrendű kvadrupóleffektus kioltási számát és a maradékellenállás-adatokkal együtt a VIII.II. táblázatban foglaltuk össze:

VIII.II. táblázat: Vakancia körüli töltéssűrűség-oszcilláció és maradékellenállás-jellemzők rézben

Módsz. \ Menny.	Elsőr. kvadr. eff.			Maradékell.	
	αA	φ	n_1	Számolt	Mért
Pszudopot.	$25,6 \cdot 2,33 \cdot 10^{-2}$	-0,39	650	1,10*	1 - 1,6*
Stehle	$25,6 \cdot 2,42 \cdot 10^{-2}$	$\frac{\pi}{2} + 0,198$	700	1,63*	[W, 3]

* $\mu\text{ohm. cm/atom } \%$

A rendelkezésünkre álló egyensúlyi vakanciakoncentráció-adat az olvadáspontban [S, 8] alapján $2 \cdot 10^{-4}$, várható intenzitáscsökkenés ...14%, ami a jelenlegi mérés-technikával kimutatható.

E becslés mellett a kísérleti megvalósítás nem látszik triviálisnak. Mindenesetre arra felhívja a figyelmünket, hogy a gyors hűtéssel előállított híg ötvözetminták (normálisan hűtve kis szennyezés-oldékonyság!) vizsgálata esetén a vakanciák hatása nem elhanyagolható. Ez a kérdés a vakancia-szennyezés kölcsönhatáson keresztül automatikusan átvezet a kétféle szennyezést tartalmazó híg ötvözetek vizsgálatának a területére.

A vizsgálatokhoz alkalmazott fóliaminták a tiszta rézhez [T, 4], [T, 6], [T, 9] hasonlóan egyes esetekben kockatextúrás szerkezettel is előállíthatók (a különböző szennyezőknek a textúra típusára és tökéletességére gyakorolt hatása sok vonatkozásban még ma sem tisztázott), így a kockatextúrás „kvázi” egykristályokon a szennyezés körüli *perturbációk anizotrópiája* vizsgálható.

Metodikai szempontból külön kell szólnunk a „*szatellitek vizsgálatának*” a lehetőségéről. Eddig az MMR-spektrum fővonalának az intenzitáscsökkenése szolgáltatott információt forrásként. Néhány esetben megfigyelték, hogy a fővonal mellett gyenge intenzitású, a szennyezéstől adott távolságra levő mátrixmagoktól származó mellékmaximumok („*szatellitek*”) lépnek fel. A Cu—Zn híg ötvözetben az általunk alkalmazotthoz hasonló mérés technikával kapott eredményt Schoemacher és tsa. [S, 14] a megfigyelt szatellit a szennyezés első szomszédjától származónak minősítették (másodrendű kvadrupól *perturbáció*). Tiszta kvadrupól rezonancia-spektroszkópia alkalmazásával Redfield [R, 1] 1963-ban néhány szatellitot figyelt meg Cu—Zn-en, ezek közül egyik, a harmadik szomszédoktól származó, jól leírható az Alfred—Van Ostenburg-féle fáziseltolódásokkal, így jól egyezik a mi eredményünkkel; a többi nem.

A „*szatellitek*” azonosítása nem egyszerű feladat, különösen akkor nem, ha az csak intenzitásmérésre van visszavezetve (porminták) ugyanis a rezonanciajel intenzitása arányos a magok számával.

Cu—Au és CuMn híg ötvözeinkben mi is detektáltunk szatelliteket (1—3), azonosításuk még nem történt meg.

Az azonosításban lényeges segítséget nyújt az egykristály — [S, 14] vagy kockatextúrás minták alkalmazása, a szatellit helyének orientációfüggése az azonosításhoz fontos segítséget ad.

A nagyobb érzékenységgű *kettőszerezonancia-módszerek* alkalmazása jelenthet lényeges előrelépést; kidolgozásuk Hahn és Hartmann [H, 6], valamint Lurie és Schlichter [L, 4] nevéhez fűződik. Segítségükkel több nagyságrendes érzékenységnövelés érhető el. Egykristály- vagy kockatextúrás híg ötvözet-mintákra való alkalmazásuk várhatóan a legteljesebb információt adják a kérdésről. A híg ötvözetek vizsgálatára történt sikeres alkalmazásukról nem található említés az irodalomban.

Függelék

Méréseinket a Szilárdtestfizikai Főosztály termomodulációs rendszerű, szélesjelű magmágneses rezonancia-spektrométerével végeztük, amit korábbi munkánkban már ismertettünk [T, 5], [T, 9]. A berendezés felbontóképessége $\sim 10^{-5}$; amplitúdó stabilítása jobb, mint 1%, amint az konkrét mérési eredményeinkből látható.

A szobahőmérséklettől eltérő hőmérsékleten történő méréseket a korábban már ismertett gázáramos hőmérsékletszabályozó rendszer [B, 3] felhasználásával végeztük, a hőmérséklet stabilitás $\sim 0,1^\circ\text{C}$, a homogenitás a minta térfogatában 1° -nál jobb.

Az MMR spektrométer érzékenységet — kis intenzitású jelek detektálására — „*idő átlagolási*” (time-averaging) technika alkalmazásával [W, 2] növeltük. NTA-512 sokcsatornás analízátor koherens detektorként való alkalmazásával a jel/zaj viszony \sqrt{N} -nel növekszik, amennyiben N -nel jelöljük a regisztrált és a sokcsatornás analízátor memóriájában fázishűen összeadott MMR-jelek számát.

KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS

Mindenekelőtt köszönet illeti a KFKI Szilárdtestfizikai Főosztálynak azokat a kutatóit, akik megteremtették a híg ötvözetek vizsgálatának a lehetőségét és a tárgy alkotó műveléséhez szükséges légkört; továbbá a Magyar Tudományos Akadémia és a Royal Society illetékeseit angliai tanulmányutamért, amely alatt az értékelés kisebb, a végső formába öntés nagyobb részét végeztem.

Személy szerint köszönetet mondok:

Pál Lénárdnak, a KFKI igazgatójának munkám erkölcsi támogatásáért, *Nagy Elemér* professzornak a „ λ -probléma” megoldását generáló megjegyzéséért, és Mindkettőjüknek hasznos diszkusszióért;

Tóth Ferenc csoportvezetőnek az MMR-méréstechnika fejlesztésében végzett munkájáért. Neki, továbbá *Bakos Ottó* tudományos munkatársnak és Méréstechnikai Csoport többi munkatársának az „idő-átlagolási” technika megvalósításáért;

Konczos Géza csoportvezetőnek, *Zámbó Lászlóné* és *Lovas Antal* tudományos munkatársaknak és a Technológiai Csoport többi munkatársának, továbbá a Csepel Művek Központi Anyagvizsgáló Laboratórium munkatársainak az anyagminták elkészítéséért, megfelelő kezeléséért és az analíziséért;

Hargitai Csaba tudományos munkatársnak, *Vasvári Béla* főosztályvezető-helyettesnek és dr. *Zawadowski Alfréd* csoportvezetőnek elméleti kérdések megvilágításáért;

Grüner György tudományos munkatársnak, *Jánossy András* és *Serfőző Gusztáv* tudományos segédmunkatársaknak az esetenként közösen végzett munkáért, egyes részletkérdések önálló megoldásáért és a sok, a szerző számára hasznos megbeszélésért;

Bánki Péter technikusnak a mérési adatok összegyűjtésében nyújtott pontos és kutatói önállóságot mutató segítségért;

továbbá mindazoknak, akik valamilyen formában vagy módon hozzájárultak az eredmények megszületéséhez.

IRODALOM

- [A, 1] *Abragam A.*: The Principles of Nuclear Magnetism, Clarendon Press, Oxford, 1961.
- [A, 2] *Averbuch P.*, de Bergevin F., Muller—Warmuth W., Comptes Rend., 249, 2315, 1959.
- [A, 3] *Alfred L. C. R.*, *Van Ostenburg D. O.*, Phys. Rev., 161, 569, 1967.
- [A, 4] *Alfred L. C. R.*, *Van Ostenburg D. O.*, Phys. Letters, 26A, 27, 1969.
- [A, 5] *Alfred L. C. R.*, *Van Ostenburg D. O.*, Preprint, közlés alatt.
- [A, 6] *Anderson P. W.*, Phys. Rev., 124, 41, 1961.
- [A, 7] *Anderson P. W.*, J. Appl. Phys., 37, 1194 s, 1966.
- [B, 1] *Ballinger R. A.*, *Marshall C. A. W.*, Proc. Phys. Soc., 91, 203, 1967.
- [B, 2] *Béal-Monod M. T.*, *Kohn W.*, J. Phys. Chem. Solids, 29, 1877, 1968.
- [B, 3] *Béal-Monod M. T.*, Phys. Rev., 164, 360, 1967.
- [B, 4] *Behringer R. E.*, J. Phys. Chem. Solids, 2, 209, 1957.
- [B, 5] *Bene E.*, *Szabó P.*, *Tompa K.*, KFKI Közl., 15, 341, 1967.
- [B, 6] *Blandin A.*, J. Appl. Phys., 39, 1285, 1968.
- [B, 7] *Bladin A.*: Varenna Lecture Notes, 1966.
- Caroli B.*, *Blandin A.*: XIV. Colloquium Ampere, Ljubljana, 1966.
- [B, 8] *Blandin A.*, *Friedel J.*, J. Phys. Radium, 21, 689, 1960.
- [B, 9] *Blandin A.*, *Daniel E. J.*, J. Phys. Chem. Solids, 10, 126, 1959.
- [B, 10] *Blandin A.*, *Daniel E. J.*, *Friedel J.*, Phyl. Mag., 14, 180, 1959.
- [B, 11] *Blatt F. J.*, Phys. Rev., 108, 285, 1957.
- [B, 12] *Bloembergen N.*: Report of Conference on Defects in Crystalline Solids, Bristol, 1954.
- [B, 13] *Brettell J. M.*, *Heeger A. J.*, Phys. Rev., 153, 319, 1967.
- [C, 1] *Caplin A. D.*, *Foiles C. L.*, *Penfold J.*, J. Appl. Phys., 39, 842, 1968.
- [C, 2] *Chapman A. C.*, *Seymour E. F. W.*, Proc. Phys. Soc., 72, 794, 1958.
- [C, 3] *Cohen M. H.*, *Reif F.*: Solid State Physics 5, 321, Acad. Press, New York.
- [D, 1] *Daniel E. J.*, J. Phys. Chem. Solids, 23, 975, 1962.
- [D, 2] *Daniel E. J.*, J. Phys. Chem. Solids, 13, 353, 1960.
- [D, 3] *Daybell M. D.*, *Steyert W. A.*, Rev. Mod. Phys., 40, 380, 1968.
- [D, 4] *Dickey J. M.*, *Meyer A.*, *Young W. H.*, Phys. Rev., 160, 490, 1967.
- [D, 5] *Daniel E.*, *Friedel J.*, Low Temperature Physics, LT-9, 933, 1964.
- [F, 1] *Faulkner A. E.*, Phyl. Mag., 5, 843, 1960.

- [F, 2] Faulkner A. E., *Nature*, 184, 422, 1959.
- [F, 3] Freeman A. J., Frankel R. B.: *Hyperfine Interactions*. Academic Press. New York, 1967.
- [F, 4] Friedel J., Guinier A.: *Metallic Solid Solutions*. Benjámín, New York, 1963.
- [F, 5] Friedel J., *Phyl. Mag.*, 43, 153, 1952.
- [F, 6] Fukai Y., *J. Phys. Soc. Japan*, 18, 1580, 1963.
- [G, 1] Gardner J. A., Flynn C. P., *Phyl. Mag.*, 138, 1233, 1967.
- [G, 2] Giffels C. A., Hinmann G. W., Vosko S. H., *Phys. Rev.*, 121, 1063, 1961.
- [G, 3] Glasser M. L., *Phys. Rev.*, 180, 942, 1969.
- [H, 1] Harrison N. A.: *Pseudopotentials in the Theory of Metals*. Benjamin Inc., New York, 1966.
- [H, 2] Heine V.: *Low Temperature Physics*, LT-9, p. 698, 1964.
- [H, 3] Howling D. H., *Phys. Rev.*, 155, 642, 1967.
- [H, 4] Hurd C. M., Gordon E. M., *J. Phys. Chem. Solids*, 29, 2205, 1968.
- [H, 5] Hurd C. M., *J. Phys. Chem. Solids*, 30, 539, 1969.
- [H, 6] Hartmann S. R., Hahn E. L., *Phys. Rev.*, 128, 2042, 1962.
- [I, 1] Itoh J., Asayama K., Kobayashi S.: *NMR and Relaxation in Solids*, North Holland, Amsterdam, 1965.
- [J, 1] Jánossy A.: magánközlemény.
- [K, 1] Kanert O., *Phys. Status Solidi* 32, 667, 1969.
- [K, 2] Kittel C.: *Quantum Theory of Solids*, Wiley, New York, 1967.
- [K, 3] Klein A. P., Heeger A. J., *Phys. Rev.*, 144, 458, 1966.
- [K, 4] Kohn W., Vosko S. H., *Phys. Rev.*, 119, 912, 1960.
- [K, 5] Kondo J., *Progr. Theor. Phys.*, 32, 37, 1964.
- [L, 1] Langer J. S., Vosko S. H., *J. Phys. Chem. Solids*, 12, 196, 1959.
- [L, 2] Linde J. O., *Annal. der Physik*, 16, 219, 1932.
- [L, 3] Lumpkin O., *Phys. Rev.*, 164, 324, 1968.
- [L, 4] Lurie F. M., Slichter C. P., *Phys. Rev.*, 133, 1108, 1964.
- [M, 1] Matsuo T., *J. Phys. Soc. Japan*, 21, 1837, 1966.
- [M, 2] Messiah A.: *Quantum Mechanics*, Wiley, New York, 1966.
- [M, 3] Meyer A., Nestor C. W., Young W. A., *Advances in Physics*, 16, 581, 1967.
- [M, 4] Moulson D. J., Seymour E. F. W., *Advances in Physics*, 16, 499, 1967.
- [N, 1] Nahajima K., Okada K., Koda S., *J. Phys. Soc. Japan*, 19, 2356, 1964.
- [N, 2] Narath A., Weaver H. T., *Phys. Rev. Letters*, 23, 233, 1969.
- [N, 3] Nozières P., Pines D., *Nuovo Cimento*, 9, 470, 1952.
- [O, 1] Odle L. R., Flynn C. P., *Phyl. Mag.*, 13, 699, 1966.
- [O, 2] Ogurtani T. O., Higgins R. A., *Phys. Rev.*, 137, 1736, 1965.
- [O, 3] Owen J., Browne M., Knight W., Kittel C., *Phys. Rev.*, 102, 1501, 1956.
- [O, 4] Owen J., Browne M., Arp V., Kip A. F., *J. Phys. Chem. Solids*, 2, 85, 1957.
- [P, 1] Pake G. E.: *Solid State Physics*, 2, 1, 1956, Academic Press, New York.
- [P, 2] Pearson W. B.: *Handbook of Lattice Spacings and Structures of Metals and Alloys*, Pergamon Press, New York, 1958.
- [P, 3] Pound R. V., *Phys. Rev.*, 79, 685, 1950.
- [R, 1] Redfield A., *Phys. Rev.*, 130, 589, 1963.
- [R, 2] Rensink M. E., *Phys. Rev.*, 174, 744, 1968.
- [R, 3] Robbins C. G., Claus M., Beck P. L., *Phys. Rev. Letters*, 22, 1307, 1969.
- [R, 4] Roberts L. D., Becher R. L., Obenshain F. E., Thomson J. O., *Phys. Rev.*, 137, 895, 1965.
- [R, 5] Rowland T. J., *Phys. Rev.*, 119, 900, 1960.
- [R, 6] Rowland T. J., Shiotani N., AIME Conference 1965.
- [R, 7] Rowland T. J., *Phys. Rev.*, 125, 459, 1962.
- [R, 8] Rowland T. J., *Phys. Rev.*, 134, 743, 1964.
- [R, 9] Roth L., Zeiger H. J., Kaplan T. A., *Phys. Rev.*, 149, 519, 1966.
- [R, 10] Rivier N., Zuckermann M. J., *Phys. Rev. Letters* 21 904, 1968.
- [R, 11] és Rivier N., Sunjic M., Zuckermann M. J., *Phys. Letters*, 28A, 492, 1969.
- [S, 1] Sagalyn P. L., Paskin A., Harrison R., *Phys. Rev.*, 124, 428, 1961.
- [S, 2] Schiff L. J.: *Quantum Mechanics*, Mc.Graw Hill 1955.
- [S, 3] Schrieffer J. R., *J. Appl. Phys.*, 38, 1143, 1967.
- [S, 4] Schrieffer J. R., Mattis, D. C., *Phys. Rev.*, 140, 1412A, 1965.
- [S, 5] Sholl C. A., *Proc. Pys. Soc.*, 91, 130, 1967.
- [S, 6] Shul H., *Phys. Rev. Letters*, 19, 442, 1967.

- [S, 7] Shulman R. B., Wyluda B. J., Anderson P. W., Phys. Rev., 107, 153, 1957.
- [S, 8] Simmons R. O., Baluffi R. W., Phys. Rev., 129, 1533, 1953.
- [S, 9] Smithsonian Physical Tables, City of Washington, 1956.
- [S, 10] Stark Yu., Shparo N. B., Soviet Physics — Solid State 5, 2618, 1964.
- [S, 11] Steinheimer R. M., Foley M. M., Phys. Rev., 102, 731, 1956.
- [S, 12] Sugawara T., J. Phys. Soc. Japan, 12, 309, 1957.
- [S, 13] Sugawara T., J. Phys. Soc. Japan, 14, 643, 1959.
- [S, 14] Schumacher R. T., Schnakamberg G., Solid State Comm., 7, 1735, 1969.
- [T, 1] Titman J. M., Kellington S. H., Proc. Phys. Soc., 90, 499, 1967.
- [T, 2] Thornton D. E., Young W. H., J. Phys. C., 1, 1097, 1968.
- [T, 3] Thornton D. E., Young W. H., Vander Molen S. E., Van der Lugt W., Phys. Letters, 27, 396, 1968.
- [T, 4] Tóth F., Tompa K., KFKI Közl., 14, 409, 1966.
- [T, 5] Tompa K., Tóth F., Magy. Fiz. F., 11, 177, 1963.
- [T, 6] Tompa K., Phys. Status Solidi 18, 391, 1966.
- [T, 7] Tompa K., 12th Low Temperature Physics, LT-12, Kyoto 1970. KFKI preprint 9/1969.
- [T, 8] Tompa K., Tóth F., Grüner Gy., Solid State Comm., 7, 51, 1969.
- [T, 9] Tompa K., Magy. Fiz. F., 16, 1, 1968.
- [V, 1] Van der Lugt W., Poulis N. J., Hardemann G. E., Hass W. P. A., Physica 23, 797, 1957.
- [V, 2] Van der Lugt W., Poulis N. J., Physica, 24, S 158, 1952.
- [V, 3] Van der Lugt W., Poulis N. J., Hass W. P. A., Physica, 25, 97, 1959.
- [V, 4] Van Vleck J. H., Phys. Rev., 74, 1168, 1148.
- [W, 1] Wolff P. A., Phys. Rev., 124, 1030, 1961.
- [W, 2] Waugh J. S., Advances in Magnetic Resonance, 2, 66, 1966.
- [W, 3] Wright P., Evans J. H., Phyl. Mag., 13, 321, 1966.
- [Z, 1] Ziman J. M., Advances in Physics, 13, 89, 1964.
- [Z, 2] Ziman J. M., Advances on Physics, 16, 421, 1967.
- [Y, 1] Yoshida Y., Közlés alatt, lásd [S, 3].
- Y, 2] Yoshida Y., Phys. Rev., 106, 893, 1957.

V-TÍPUSÚ CENTRUMOK VIZSGÁLATA KCl(Ca) RENDSZERBEN

GYÖRGYINÉ HORVÁTH TÜNDE

Semmelweis Orvostudományi Egyetem, Biofizikai Intézet, Budapest

TARTALOMJEGYZÉK

	Oldal
Bevezetés	64
I. Irodalmi áttekintés	65
1. F-típusú centrumok	65
1.1 Az F-centrum	65
1.11 Az F-centrum optikai sávja és oszcillátorerőssége	65
1.12 Az F-centrum vizsgálata ESR és ENDOR módszerrel	67
1.2 Egyéb F-típusú centrumok	68
2. Paramágneses V-típusú centrumok	70
2.1 V-típusú centrumokról általában	70
2.2 A V_K -centrum	71
2.3 A V_K^M -centrum	75
2.4 Egyéb paramágneses (H^- , V_F^- , V_t^-) centrumok	78
3. V-típusú centrumok KCl-ban	79
3.1 Tiszta KCl kristály V-típusú centrumai	79
3.2 $Ca^{+ +}$ -mal szennyezett KCl kristály V-típusú centrumai	81
4. A színezés mechanizmusáról	83
4.1 Tiszta kristály színeződése	83
4.2 KCl(Ca) színezésével kapcsolatos előzmények	84
II. Az alkalmazott vizsgálati módszerek és előzmények	86
5. Kísérleti eljárások	86
5.1 OH ⁻ mentes KCl egykristály előállítása és szennyezettségének meghatározása	86
5.2 A kriosztát és a hőmérséklet-szabályozó felépítése	88
5.3 Egyéb vizsgálati módszerek	89
5.31 Röntgenbesugárzás és abszorpciómérés	89
5.32 ESR mérés	90
6. KCl (Ca)-on végzett mérések eredményei és azok értékelése	90
6.1 Kísérleti eredmények	90
6.11 Szobahőmérsékleten történő röntgen besugárzás hatásának vizsgálata és a V_2^M -centrum oszcillátorerősségnek meghatározása	90
6.12 A 195° K-on röntgenezett kristály vizsgálata és a V_K^M -centrum oszcillátorerősségének meghatározása	94
6.13 A $V_2^M \rightarrow V_K^M$, $V_{2,K}^M$ átalakulás vizsgálata	96
6.2 Diskusszió	97
Összefoglalás	99
Irodalom	100

Bevezetés

A röntgensugárzás felfedezésével szinte egyidejű az a felismerés, hogy az alkáli-halogenidek röntgensugárzás hatására színeződnek. A keletkező abszorpciós sávok nagy része abba a tartományba esik, ahol egyébként az anyag átlátszó. A kristály színét döntően meghatározó sávot *F*-sávnak nevezzük. Kedvező körülmény, hogy egyes abszorpciós sávok más módon is létrehozhatók, pl. a kristálynak alkálifém-gőzben való hevítése által, (ún. additív színezés) és így kialakulásukra vonatkozólag további információkat nyertünk.

Az új abszorpciós sávokat létrehozó kristályhibákat az ún. színcentrumokat két csoportra osztjuk: elektront kötő v. *F*-típusú és defektelektront (lyukat) kötő v. *V*-típusú centrumokra. Tágabb értelemben a színcentrumokhoz soroljuk az idegen ionok beépülésével keletkező ponthibákat is.

A sugárzás által kiváltott folyamatok tanulmányozása, a színcentrumok tulajdonságainak, természetének megismerése érdekében az optikai módszereken kívül számos más vizsgálati eljárást is alkalmaznak, pl. a lumineszcenciára, az elektron- és ionvezetőképességre, ionos termoáramra (ITC), diffúzióra, hővezetésre, dielektromos és mágneses szuszceptibilitásra és a deformációs hatásokra vonatkozó méréseket. Forradalmi jelentőségű volt (különösen a *V*-típusú) páratlan spinű centrumok vizsgálatával kapcsolatban az elektronspin rezonancia (ESR), majd a kettős rezonancia (ENDOR) módszer alkalmazása, amelyek alapján egyrészt biztos választ lehetett adni a centrumok szerkezetével összefüggő több, addig el nem döntött kérdésre, másrészt új centrumok is felderíthetőkkelé váltak.

Mind a színezés folyamatával, mind — különösen a diamágneses *V*-típusú — centrumok szerkezetével kapcsolatban azonban még sok probléma tisztázatlan. Ezek egyike — amihez egyébként saját vizsgálataink is kapcsolódnak — az, hogy a kétvegyértékű alkáliföldfém szennyezés (Ca, Ba, Sr stb.) mily módon növeli meg a színezhetőséget (a dózis egységre eső *F*-centrum koncentrációt) a tiszta kristályhoz képest a színezés kezdeti szakaszában. Ez a kérdés szoros kapcsolatban van azzal a problémával, hogy milyen *V*- és *F*-típusú centrumok jönnek létre szobahőmérsékleten tiszta és szennyezett kristályokban. Nehézséget jelent a probléma megoldásánál az a tény, hogy a szobahőmérsékleten stabilisan keletkező defektelektron-centrumok általában diamágnesek.

A dolgozat első (I) részében (az *F*-típusú centrumok rövid ismertetése után) áttekintést adunk a különböző hőmérsékleten keletkező *V*-típusú centrumokról. E rész szokottnál hosszabb terjedelmét az indokolja, hogy (különösen a diamágneses) *V*-típusú centrumokról az utóbbi hat év során nem jelent meg összefoglaló munka. Ugyancsak a dolgozat összefoglaló részében kerül sor a röntgensugárzással való színezés mechanizmusára vonatkozó eddigi eredményeknek rövid ismertetésére is.

A dolgozatnak második (II) részében a kísérleti eljárások ismertetése után térünk rá a kétvegyértékű alkáliföldfém szennyezést tartalmazó KCl kristályban szobahőmérsékleten röntgensugárzás hatására keletkezett *V*-típusú centrumok tárgyalására. Célunk az volt, hogy

1. vizsgáljuk a kétértékű kalcium szennyezés hatását a színcentrum képződésre, a szobahőmérsékleten történő színezés kezdeti szakaszában;
2. tisztázzuk, van-e kapcsolat a szobahőmérsékleten való röntgenezés hatására az *F*-centrummal együtt keletkező — eddig ismeretlen struktúrájú — defektelektront

kötő centrumok és az alacsonyabb hőmérsékleten stabilis — ismert felépítésű — V-típusú centrumok között. U. amennyiben kapcsolat áll fenn, remélhető, hogy az ismeretlen struktúrájú diamágnés centrumok modellje közvetett úton meghatározható.

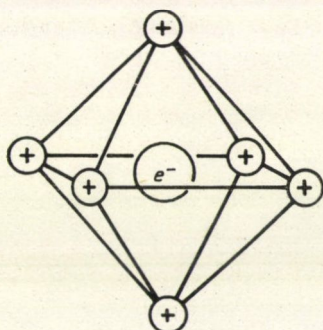
I. Irodalmi áttekintés

1. F-típusú centrumok

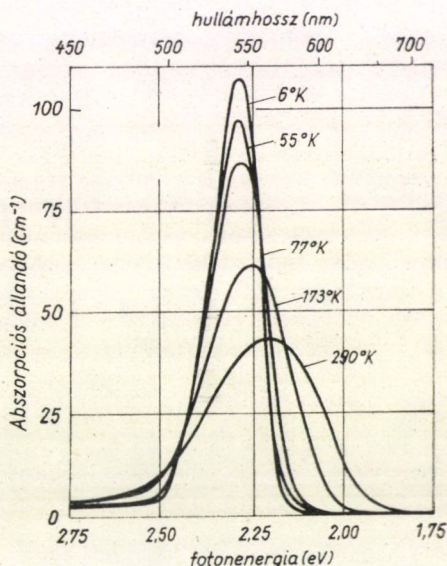
1.1 Az F-centrum

1.11 Az F-centrum optikai sávja és oszcillátor erőssége

Az F-centrum a legtöbbet vizsgált és a legjobban ismert centrum. Előállítható különböző színezési eljárásokkal (ionizáló sugárzással, additív eljárással, elektroli-zissal). Struktúrája teljesen tisztázott: a kristályban pozitív töltésként ható halogén hiányhely által hidrogénszerű állapotban kötött elektron. Atomi modellje az 1. ábrán látható. A tiltott sávban elhelyezkedő alapállapotból az ugyancsak tiltott sávbeli első gerjesztett állapotba való ($1S \rightarrow 2P$) átmenetnek megfelelő abszorpciós sáv az F-sáv, amelynek félértékszélessége és maximumának helye a hőmérséklettől függ (2. ábra).



1. ábra
F-centrum modellje



2. ábra.
F-sáv különböző hőmérsékleteken KCl-ban

Feltételezve, hogy a kristály köbös szimmetriájú és, hogy az F-centrum jól lokalizált a kristályban (elegendő a Lorentz-féle belső térrel számolni), akkor a fenti átmenetre az oszcillátor erősséget (f) a következő kifejezés — az általánosított Smakula-formula (1) — adja:

$$N \cdot f = 8,21 \cdot 10^{16} \frac{n}{(n^2 + 2)^2} \int \alpha(E) dE, \quad (1)$$

ahol N a centrumkoncentráció, n a törésmutató a sáv maximumban; az integrál kifejezés pedig az integrális abszorpciós állandó.

Lorentz-típusú abszorpció s görbe esetén (1) átme gy a klasszikus diszperzió elmélet alapján számolt ún. Smakula-féle formulába [1], melynek szokásos alakja:

$$N \cdot f = C \alpha H, \quad (2)$$

ahol

$$C = 1,29 \cdot 10^{17} \frac{n}{(n^2 + 2)^2},$$

α : az abszorpció s konstans (cm^{-1}) a maximum helyén és H : a félértékszélesség (eV). Az F -sáv és általában a legtöbb abszorpció s sáv az újabb megállapítások szerint [2, 3] inkább Gauss-görbe alakú. Az (1)-beli integrálást erre elvégezve szintén (2) alakú kifejezés adódik, a C konstans értéke ekkor:

$$0,86 \cdot 10^{17} \frac{n}{(n^2 + 2)^2}.$$

A koncentráció, a törésmutató és az optikai abszorpció mérésével f értéke meghatározható. Hasonlóan, ha f értékét ismerjük, akkor a centrumkoncentráció számolható. Az oszcillátorerősségnek kvantummechanikai számolásakor alkalmazott közelítések nagy száma miatt f -et — legalábbis részben — empirikus paraméternek kell tekintenünk, ezért adott rendszer — pl. F -centrumok — esetében célszerűbb az oszcillátorerősséget kísérletileg meghatározni. Így azután e rendszer centrumkoncentrációját már csupán abszorpcióméréssel meghatározhatjuk.

Az I. táblázatban összefoglaltunk néhány oszcillátorerősség adatot KCl F -centrumára nézve, feltüntetve többek között a centrumkoncentráció meghatározás módját is. Az L , ill. G index a Lorentz-, ill Gauss-görbének megfelelő értéket jelöli.

1. Táblázat

Kutató	Évszám	Színezési mód	Koncentráció megh.	f_L	f_G
Kleinschrod [4]	1936	additív	kémiai	0,81	0,55
Silsbee [5]	1956	rtg	ESR	0,85	0,58
Rauch—Heer [6]	1957	additív	mágneses szuszcept.	0,74	0,50
Lüty [7]	1960	additív	terület*	0,85	0,58

Megjegyezzük, hogy még a legújabb irodalomban is mind a 0,8, mind a 0,5 körüli oszcillátorerősség értékekre való hivatkozás megtalálható.

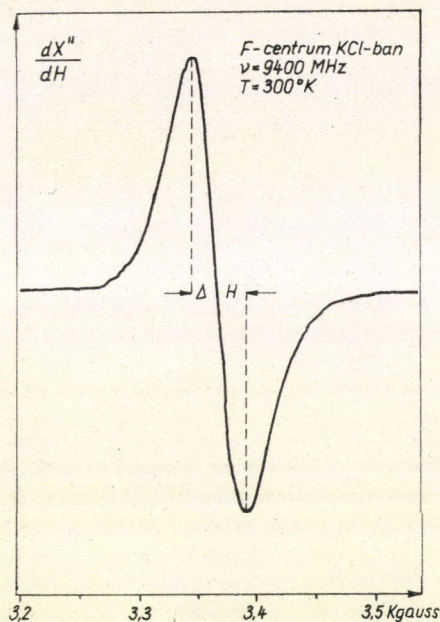
Színtelenítési vizsgálatok alapján módunk van pl. az F -centrum oszcillátorerősségének ismeretében olyan centrumra vonatkozó oszcillátorerősség kiszámítására is, mely az F -centrummal korrelációban van (ilyenek pl. az M és dolgozatunkban részletesen tárgyalásra kerülő V_2^M -centrumok).

* Ennél a módszernél a szerző az F -abszorpció s sáv és az F -centrum magasabb gerjesztési állapotaihoz tartozó K , L_1 , L_2 , L_3 -sávok területarányától határozta meg az oszcillátorerősséget.

1.12 Az *F*-centrum vizsgálata ESR és ENDOR módszerrel

Az *F*-centrum ESR jelét Hutchison [8] mérte először, őt követően sorra vették az összes alkálihalogenid kristályt és megállapították, hogy

1. legtöbb esetben a spektrum egyetlen széles Gauss-görbe alakú vonalból áll. A vonalszélesség kb. 50 és néhány 100 gauss között van. A 3. ábra KCl *F*-centrumának



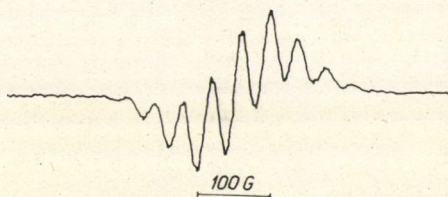
3. ábra
KCl *F*-centrumának ESR jele

nak ESR jelét mutatja (vonalszélesség (ΔH) 47 gauss).

2. Néhány anyagnál (pl. LiF, NaF, RbCl) a széles ESR spektrum többé-kevésbé felbontott struktúrájú [9]. Ilyet látnak a 4. ábrán Li⁶F-r.

A *g*-faktor minden esetben valamivel kisebb, mint a szabad elektroné (negatív *g*-eltolódás).

A struktúra nélküli vonalat Kipp és munkatársai [10] úgy értelmezték, hogy ez tulajdonképpen burkoló görbéje a fel nem oldott igen nagyszámú — az elektron és a



4. ábra
Li⁶F *F*-centrumának ESR jele [9] a függőleges tengelyre a $d\chi''/dH$ van felmérve, ahol χ'' a mágneses szuszceptibilitás imaginárius része

környező hat alkáli mag hiperfinom kölcsönhatásából származó — vonalnak. KCl-nál pl. az elektron és a szomszédos 3/2 spinű hat kálium mag kölcsönhatásából $2 \cdot 6 \cdot 3/2 + 1 = 19$ vonalat várnánk 1:6:21:56:120:216:336:456:546:580:... 1 intenzitás viszonyokkal.

Azért, hogy a vonalszélességre a kísérletileg és a számolással kapott értékek jobban egyezzenek, fel kellett tételezni, hogy a közvetlen közeli alkáli magokon kívül az elektron még távolabbi ionok magjaival is kölcsönhatásban van; ez pedig a vonalak további felhasadását jelenti. Ezért célszerűen az *F*-centrum rácskörnyezetét „héjakra” osztották fel. Az I. héjat a hat legközelebbi, II. héjat a következő 12 s.i.t. ionok képezik. Az *F*-centrum jelének inhomogén kiszélesedését tehát e héjakon elhelyezkedő ionokkal való kölcsönhatás okozza, ami a 3. ábrán látható struktúra nélküli jelnél egyáltalán nem, a 4. ábrán bemutatott, némi struktúrával rendelkező jelnél részlegesen feloldott. (Az utóbbinál látható felhasadás a II. héj fluorjaival történő izotróp hiperfinom kölcsönhatásból származik.)

A hiperfinom kölcsönhatás felbontása a Fehér [11] által kidolgozott ún. ENDOR (elektron-mag kettős rezonancia) módszerrel történik. Fehér először KCl-ban, majd

Seidel [12] KBr-ban vizsgálta az F -centrumhoz tartozó elektron kölcsönhatását a környezettel, és ENDOR technika segítségével kimutatta: még a VIII. héjnak is van hatása az F -elektron energiájára.

Az ENDOR spektrum analíziséből módunkban van a hiperfinom kölcsönhatás szögtől független (izotróp) és szögtől függő (anizotróp) részének meghatározására. Az izotróp tag arányos az elektron tartózkodási valószínűségével valamelyik mag helyén $|\psi(0)|^2$, az anizotróp tag pedig a dipól-dipól kölcsönhatásra jellemző.

Az elektron tartózkodási valószínűségére vonatkozólag az F -centrum környezetében Gourary és Adrian [13] által kidolgozott „pontionrács” közelítéssel kapott elméleti és Seidel [12] kísérleti adatai alapján megállapíthatjuk, hogy pl. KBr-ban kb. 65% valószínűséggel találjuk az elektront az anion helyen, kb. 30%-ban az első és kb. 5%-ban a második héjon; kevesebb mint 1% marad a távolabbi héjakra.

Az F -centrumbeli elektron g -eltolódásának értéke a spin-pálya csatolás erősségével és a gerjesztési energiával (F optikai sáv) hozható kapcsolatba. Minél nehezebbek az F -elektront körülvevő ionok, annál nagyobb eltolódást várunk; valóban növekvő g -eltolódást figyeltek meg rendre pl. KCl, KBr és KJ esetében.

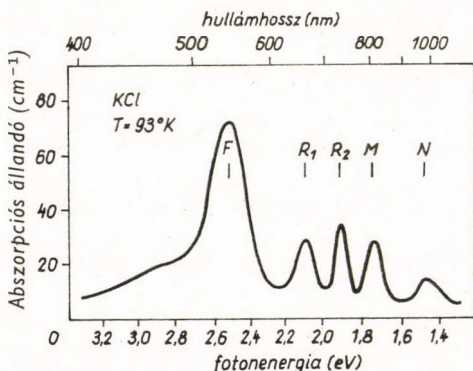
1.2 Egyéb F -típusú centrumok

Az F' -centrum

Ha egy F -centrumokat tartalmazó kristályt valamely kritikus hőmérséklet (KCl-ban 180°K) alatt F -fényvel megvilágítunk, az F -sáv csökkenésének rovására az F -sáv hosszúhullámú oldalán egy új, széles sáv: az F' -sáv jelenik meg. Kvantumhatásfok mérésekből [14, 15] bebizonyosodott, hogy a fotokémiai folyamat során két F -centrum elpusztulásából egy F' -centrum és egy negatív ionhiányhely keletkezik. A centrum elektronszerkezetéről keveset tudunk, eredő spinje zérus, triplett állapota nem ismeretes.

Az M -, R - és N -centrumok

Fény besugárzás, vagy hosszabb ideig tartó röntgenezés hatására az F -centrumok társulása révén új centrumok: M , R (R_1 , R_2) és N (N_1 , N_2) jönnek létre, amelyek abszorpciója az F -sáv hosszúhullámú oldalára esik (5. ábra).



5. ábra

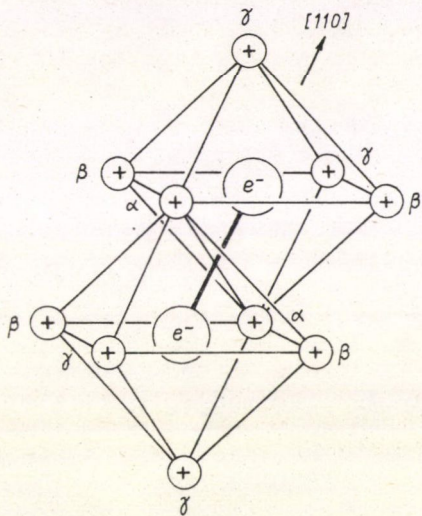
Additive színezett KCl kristály optikai abszorpciója F -fényvel (546 nm) történő besugárzás után

Az M -centrumra ma már általánosan elfogadott van Doorn és Haven [16] modellje, mely szerint az M -centrum egy $\langle 110 \rangle$ irányban kapcsolódó F -centrumpár (6. ábra). Várhatóan az $M \equiv F_2$ modell szerint az M -centrum diamágneses [17, 18]. Ugyanekkor Seidel [19] ESR és ENDOR módszerrel kimutatta, hogy létezik az M -centrumnak olyan metastabilis állapota, amelyhez $S=1$ spin tartozik; így közvetve igazolta a két F -centrumos modellt.

Pick [20] alkotta meg az addigi kísérleti eredményeket értelmező további

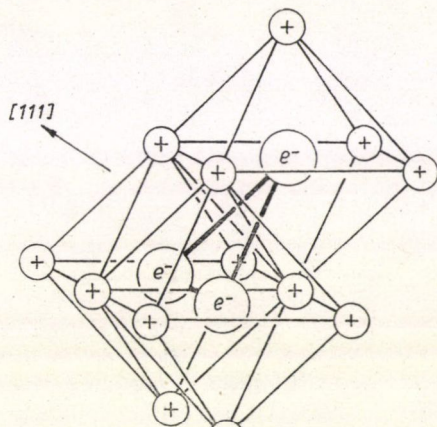
F -aggregát centrumok modelljeit, amelyeket azután a későbbi ESR vizsgálatok részben igazoltak [21, 22, 23]. Mivel R_1 - és R_2 -sávok viszonya megközelítőleg állandó, feltételezte, hogy ezek ugyanannak a centrumnak (R -nek) két különböző átmenetét jelentik és hogy a centrum három olyan F -centrumból áll, melyek az $\langle 111 \rangle$ szimmetriatengelyű egyenlő oldalú háromszög csúcsában helyezkednek el (7. ábra): $R \equiv F_3$.

Az N_1 - és N_2 -centrumokra javasolt modellek csak részben egyeztethetők össze a kísérleti eredményekkel. Röntgenezett KCl kristálynál valószínűnek látszik, hogy az N_2 -centrum az F - és R -centrumok társulásából jön létre (8. ábra): $N \equiv F_4$.



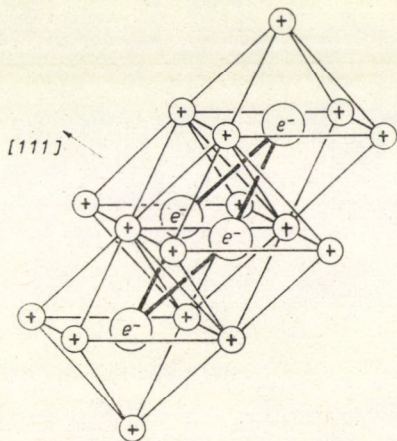
6. ábra

M -centrum modellje; α , β , γ , a környező alkáli-ionokat jelöli növekvő távolság szerint



7. ábra

R -centrum modellje



8. ábra

N_1 - és N_2 -centrum modellje

Az F -, M - és R -centrumoknak léteznek magasabban gerjesztett állapotai és így egy-egy centrumhoz az optikai átmenetek egész sorozata rendelhető. (Pl. így rendelhetjük F -hez a K , L_1 , L_2 és L_3 gerjesztett állapotokat (sávokat) [24].)

Az F -, F' -, M -, ... centrumok a kristályban (pl. fehér fényrel történő megvilágítás hatására) szabad elektronok forrásai lehetnek, amelyek azután más típusú centrumokkal pl. defektelektronnal lyukkal kapcsolatos ún. V -típusú centrumokkal rekombinálódhatnak; a kapott megváltozásokból azután e centrumok szerkezetére vonhatunk le következtetéseket.

Az F -típusú centrumok képződésével kapcsolatban még sok probléma vár tisztázásra, sőt magának az F -centrumnak képződési mechanizmusa sem teljesen tisztázott. Keveset tudunk még az F -centrumok térbeli eloszlásáról és kölcsönhatásukról.

2. Paramágneses V -típusú centrumok

2.1 V -típusú centrumokról általában

Ionizáló sugárzás hatására jönnek létre az F -sáv rövidhullámhosszú oldalán az UV tartományban elhelyezkedő H - és a különböző indexszel ellátott V_1 -, V_2 -, V_3 -, ... közös néven V -típusú sávok [25, 26]. E sávok relatív intenzitása erősen függ a besugárzás hőmérsékletétől és idejétől; változások lépnek fel abszorpcióban a besugárzást követő hőkezelés során is. (V -típusú sávok létrehozhatók még bizonyos kristályoknál (pl. KBr , KJ esetében) halogén gőzben való hevítés során, vagy elektrolitikus színezéssel.) A V -sávok egyértelmű jelölése komoly gondot okozott a kutatóknak. Nehézséget jelent pl., hogy különböző kutatók ugyanazt a jelölést adták valójában különböző sávoknak.

További komplikáció forrása volt, hogy néhány szennyezés (pl. OH , Cu , Ag) abszorpciós sávja is a V -sávok tartományába esik és hogy magukat a V -sávokat is befolyásolhatja a kristályban levő szennyezéstartalom. Ezért a régebbi mérési eredményeket — amikor ui. még nem ismerték pontosan a kristály tisztasági fokát — kritikával kell tekintetbe venni. A V -sávok kutatásának egyik legfőbb követelménye tehát: „tisztá” kristály előállítása. KCl és KBr esetében zónázásos módszerrel — különös tekintettel az OH^- és kétértékű fém-szennyezésekre — szép eredményeket értek el [27].

A sávok felfedezésével egyidejűleg felmerült a sávokhoz tartozó centrumok atomi szerkezetének kérdése. A kérdés tisztázására megindultak a közönséges és lineárisan poláros fényben történő abszorpciós, szintelenítési, majd kinetikai, lumineszcencia stb. vizsgálatok. Seitz 1954-ben megjelent összefoglaló munkájában [28] főleg spekulatív úton javasolt modelleket. E szerint a V -centrumok a kristályban (pl. sugárzás útján létrehozott) lyuk állapotnak alkali hiányhelyhez vagy egyszerűbb hiányhelycsoportosuláshoz való kötődését jelentik (9a. ábra). Ugyanekkor Varley [29] intersticiális képződményeket és alkali vakanciákat elfoglaló halogéneket feltelezett.

A kérdés fontosságát növeli az a tény, hogy amíg — mint említettük — a V -centrumok kialakulása függ a besugárzás hőmérsékletétől és dózistól, addig az F -centrumok széles hőmérséklet- és dózistartományban képződnek a kristályban. Ha tisztázni akarjuk az F -centrum képződési mechanizmusát röntgensugárzás hatására, megbízható modelleket kell alkotnunk az F -centrumokat minden esetben kiegészítő centrumokról: (a defektelektront kötő) V -centrumokról.

A páratlan spinű V -centrumoknál — mint már említettük — az ESR technika alkalmazása tette lehetővé a pontos modellalkotást. Valamely rezonancia jel és optikai sáv közös centrumhoz rendelése — azaz a centrum identifikálása — következő (ismert) módokon történhetik:

a) az ESR jel és az optikai sáv változásának összehasonlításával a besugárzás folyamán;

b) valamely polarizált fény szintelenítő hatásának vizsgálatával az ESR és optikai spektrumra;

c) a reorientációs hőmérséklet és a centrum bomlási hőmérsékletének meghatározásával mindkét módszer segítségével.

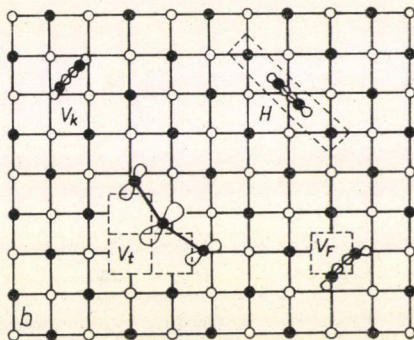
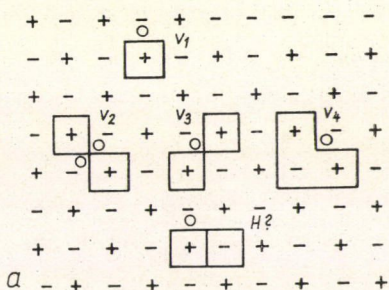
Megfelelő polarizált fény hatására a kristály kettős törésének megszűnése, a kiirányított centrumok reorientációja azon a hőmérsékleten következik be, amelyen a lyukak szabad termikus mozgása biztosítva van. A reorientációs hőmérséklet általában alacsonyabb mint a centrum elbomlásához tartozó hőmérséklet, és ugyanakkor pontosabban is meghatározott, minthogy a lyukat kötő centrum pusztulásában a szabad elektronokkal történő rekombináció is lényeges szerepet játszik.

Először a *paramágneses V-típusú* centrumokat tekintjük át, minthogy tudásunk ezekről a legmegalapozottabb.

2.2 V_K -centrum

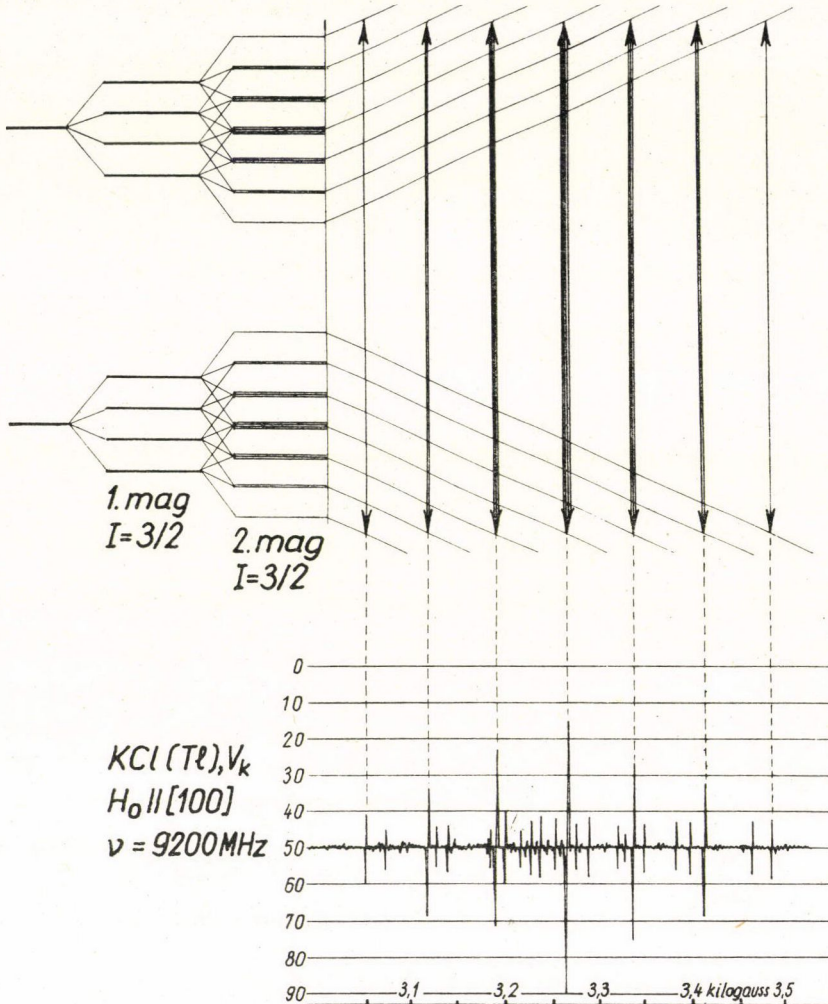
Első hírt paramágneses V -centrumról Känzig [30] adott 1955-ben, majd munkatársaival együtt [31, 32] behatóan vizsgálták a 80°K hőmérsékleten röntgenezett NaCl, KCl, KBr és a LiF kristályok ESR jelét és megállapították, hogy a rezonancia-abszorpció a kristályban $\langle 110 \rangle$ irányú molekulatengellyel rendelkező halogén molekulaiontól (X_2^-) származik. A röntgensugárzás által valamely halogén (X^-) ionról eltávolított elektron helyét, a lyukat két szomszédos halogén köti meg: a rácsban helyileg pozitív töltésű centrum jön létre (9b. ábra). A vizsgálatok szerint a létrejött halogén molekulaion sem hiányhelyhez, sem egyéb szennyezéshez nem kötődik a rácsban; az önmagát megfogott („self trapped”) lyuk kötési energiája főleg molekula-kötésből származik, a környezet polarizációja a lyuk körül nem játszik lényeges szerepet. Ez a centrum tehát — a többi paramágneses V -centrummal együtt, de elentétben az elektroncentrumokkal — jól lokalizált a rácsban: a centrum és a rács között gyenge kölcsönhatás lép fel. Ezt a centrumot később Känzigről V_K -centrumnak nevezték el.

Az X_2^- molekulaion magjai és a nem teljesen betöltött elektronhéj közötti, vi-



9. ábra
 V -centrum modellek
(a) Seitz és b) Känzig szerint)

szonylag nagy hiperfinom kölcsönhatás ESR-val jól feloldható. KCl esetében pl. a lyuk két azonos $I = 3/2$ spinű Cl maggal van intenzív kölcsönhatásban. Ennek megfelelően $(2 \cdot 2 \cdot 3/2 + 1) = 7$ vonalat $1:2:3:4:3:2:1$ intenzitás viszonyokkal várunk, ami a két mag azonos mágneses momentumaiból származó degeneráció követke-



10. ábra

V_K -centrum ESR spektruma és mágneses átmeneteiematikusan

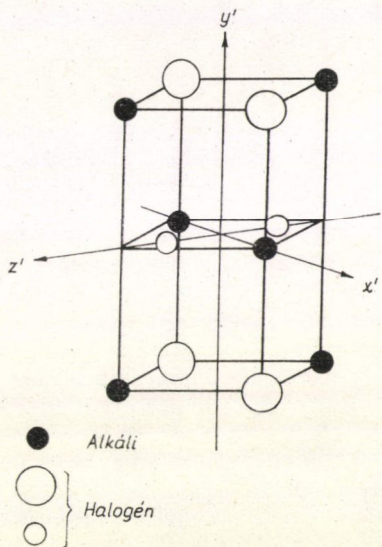
ménye (10. ábra). Az ábrán ezeken kívül még több azonos intenzitású vonalat is látunk, ami a degeneráció megszűnésének, az izotópeffektusnak a következménye. A természetes Cl ui. 75%-ban tartalmaz Cl^{35} és 25%-ban Cl^{37} elemeket, így a V_K -centrumnál a megfelelő megtalálási valószínűségek $3/4$, ill. $1/4$. Tehát a következő kom-

binációk jöhetnek számításba a megfelelő előfordulási valószínűségekkel:

$$\text{Cl}^{35}-\text{Cl}^{35}:\text{Cl}^{35}-\text{Cl}^{37}:\text{Cl}^{37}-\text{Cl}^{37} = 9/16:6/16:1/16.$$

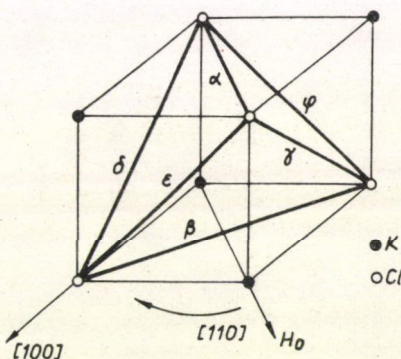
A Cl^{35} és Cl^{37} azonos spinűek ugyan, de mágneses momentumaik különböznek. Így $\text{Cl}^{35}-\text{Cl}^{35}$ és $\text{Cl}^{37}-\text{Cl}^{37}$ -ből álló V_K -centrumok spektrumai hasonlóak lesznek, de vonalközben és intenzitásban különbözni fognak. Az ábrán látható intenzív vonalcsoport a $\text{Cl}^{35}-\text{Cl}^{35}$ összeállításból adódik. A vegyes összeállításnál a kétféle mágneses momentum miatt megszűnik a degeneráció: 16 egyenlő intenzitású vonal jelenik meg.

A V_K -centrum elhelyezkedését a kristályban a 11. ábra mutatja. Az üres karikák anionokat, a fekete körök a kationokat jelölik; a megfelelően felvett $x'y'z'$ koordináta rendszerben z' a molekulaion tengelye.



11. ábra

V_K -centrum elhelyezkedése a kristályban. A molekulaion tengelye z' irányba mutat



12. ábra

V_K -centrum tengelyének lehetséges irányai a kristályban

A g -faktor komponenseinek értékéből pozitív g -eltolódás és a tengelyszimmetriától eltérés adódott. (Tengelyszimmetrikus esetben a tengelyre merőleges komponensek egyenlőek: $g_{x'y'} = g_{y'y'}$.) Valóban a modell szerint a centrum körül a kristálytér rombos szimmetriát mutat.

V_K -centrumnál az elektroneloszlás a molekulaion tengely körül — első közelítésben — tengelyszimmetrikusnak tekinthető; ekkor a hiperfinom kölcsönhatási állandóra (A) a következő egyszerű formában felírható kifejezés adódik:

$$A = a + b(3 \cdot \cos^2 \vartheta - 1), \quad (3)$$

ahol a az izotróp tag, b a dipól-dipól kölcsönhatásra jellemző érték, ϑ pedig a centrum szimmetriatengelye és a külső mágneses tér közötti szög. A értékét a különböző szögálláshoz tartozó spektrumok vonal távolságából nyerhetjük. A hat különböző irányú V_K -centrum közül, ha az alkalmazott külső állandó mágneses tér (H_0) iránya pl. párhuzamos valamely $\langle 100 \rangle$ kristálytani tériránnyal 4 db centrum ($\alpha, \beta, \gamma, \delta$) 45° -os szöget és 2 db (ϵ, φ) 90° -os szöget zár be a külső térrel (12. ábra, 2. táblázat).

Ilyen beállítás esetén kétszer annyi centrumhoz tartozik nagy $A = a + \frac{b}{2}$ érték: a nagyobb intenzitású vonalak egymástól távolabb helyezkednek el, ezekre a spektrum általában jól kiértékelhető. A 90° -os szöggel beállító centrumok vonalai a spektrum közepe táján halmozódnak fel (10. ábra). *Delbecq, Smaller és Yuster* [33] állapított

2. táblázat

H_0 iránya	θ szög	Eloszlás
$\langle 100 \rangle$	45°	4
	90°	2
$\langle 110 \rangle$	0°	1
	60°	4
	90°	1
$\langle 111 \rangle$	$35,26^\circ$	3
	90°	3

ták meg, hogy az X_2^- molekulaionnak megfelelő optikai sáv maximum helye KCl-ban 365 nm-nél van (3. táblázat); a centrum azonosítása polarizációs fényvel való színtelenítéssel cseppfolyós nitrogén hőmérsékleten történt. Kimutatták továbbá a halogén molekulaion termsémája alapján megjósolt gyenge optikai átmenetnek megfelelő abszorpciót infravörösben (750 nm-nél). Az azonos centrumhoz való tartozást bizonyította az a tény, hogy az egyik sávban létrehozott dichroizmus a másik sávban történő besugárással megszüntethető. Ez viszont azt jelenti, hogy vagy a 365 nm-es, vagy a 750 nm-es sávban történő abszorpció olyan gerjesztett állapotot idéz elő, amelyből bármelyik $\langle 110 \rangle$ irányba reorientálódhatik a centrum. Tekintve,

3. táblázat

Anyag neve	Izotóp	Magspin	ESR-spektrum				Optikai spektrum		
			vonal-szám	vonal-szélesség	$a + b$ (G)	a (G)	max helye (nm)		félérték-szélesség
LiF	$^{19}\text{F}—^{19}\text{F}$	1/2	3	$12,3 \pm 0,3$	887	59	348 750	3,65 1,65	1,20
KCl	$^{35}\text{Cl}—^{35}\text{Cl}$	3/2	7	$1,34 \pm 0,03$	101	9	365 750	3,40 1,65	0,81 0,37
NaCl	$^{35}\text{Cl}—^{35}\text{Cl}$	3/2	7	$4,5 \pm 0,1$	98	9	360 660	3,46 1,89	
KBr	$^{81}\text{Br}—^{81}\text{Br}$	3/2	7	$2,8 \pm 0,1$	455	80	385 750 900	3,22 1,65 1,38	0,73 0,26
KI	$^{127}\text{I}—^{127}\text{I}$	5/2	11?	?	?	?	400 585 800 1150	3,10 2,12 1,55 1,08	0,55 0,36 0,22 0,19

hogy a reorientáció igen alacsony hőmérsékleten is végbemegy, további adatot szolgáltat ahhoz a megállapításhoz, miszerint a V_K -centrum nincs hiányhelyekkel kapcsolatban; ui. nem valószínű, hogy ilyen alacsony hőmérsékleten a hiányhelyek mozgékonyak legyenek.

Vizsgálták a centrum termikus úton való színtelenedését és megállapították, hogy a színtelenedés hőmérséklete erősen függ a szennyezés tartalomtól. (Tiszta KCl kristályban ez 130 °K, míg Ag- és Tl-mal szennyezett esetben 200 °K körül van).

Az optikai és paramágneses rezonancia spektrum összehasonlításával más alkáli halogenideknél (KBr, LiF, KJ) is megtalálták a Br_2^- , F_2^- és I_2^- molekulaion optikai átmeneteihez tartozó abszorpciós sávokat [34]. Néhány V_K -centrumra vonatkozó ESR és optikai spektrum adatot (cseppfolyós nitrogén hőmérsékleten mérve) a 3. táblázatban foglaltunk össze. KJ-ban — a másodrendű effektusok vagy más nem ismert centrum vonalai miatt — a I_2^- -hoz tartozó centrum rezonancia vonalait nem sikerült identifikálni (erre utal a kérdőjel a 3. táblázatban); itt az optikai adatok megbízhatóak.

A LiF F_2^- -centrumának ESR spektruma igen széles mágneses tartományt fed át; ez a fluor magok és a kötött lyuk közötti nagy hiperfinom kölcsönhatás eredménye. Ugyancsak a többi alkali halogenid V_K -centrumával ellentétben a vonalszélesség is viszonylag nagy (3. táblázat), ami az F_2^- -centrum páratlan spinje és a centrumot körülvevő szomszédos magok igen erős hiperfinom kölcsönhatására utal. *Gazzinelli és Mieher* [35] majd *Daly és Mieher* [36] tanulmányozták az F_2^- -centrumhoz kötött lyuk ENDOR spektrumát LiF-ban. Azonkívül, hogy igazolták a már elfogadott modellt, megmérték a centrumot körülvevő magok hiperfinom állandóit. A megfigyelt értékek értelmezésére legvalószínűbb feltételezés a „zárt héjú” 2p-típusú molekulapályák polarizációja volt; ekkor lesz ui. nem zérus spinsűrűség a környező magok helyén. *Bailey* [37] pedig a különböző alkali fluoridok V_K -centrumainak ESR vonalszélességét vizsgálva megállapította, hogy a vonalszélesség egyenes arányban van az F_2^- közvetlen közelében elhelyezkedő alkáli magok (Li, Na, K, Rb) mágneses momentumával (a vonalszélességek rendre 12,9; 11; 8,9; 2,6 gauss-nak adódnak).

Castner és Känzig [31] megfigyelték, hogy ha elektronelfogó szennyezést (Tl^+ , Ag^+ , Pb^{++} stb.) építenek be a kristályba, három nagyságrenddel nagyobb V_K -centrum koncentrációt kapnak ugyanolyan besugárzási feltételek mellett, mint tiszta kristályban. E szennyező ionok ui. a röntgenezéskor szabaddá vált elektronokat megkötik, a lyukak rekombinációs lehetősége csökken; több V_K -centrum stabilizálódik mint tiszta kristályban, ahol magának a sugárzásnak kell termelnie az elektronelfogó helyeket, az anion vakanciákat.

A gondos vizsgálatok szerint [33] az alkalmazott szennyezés nem befolyásolja a V_K -centrum ESR spektrumát és optikai abszorpcióját; a V_K -centrum struktúrája független a szennyezéstartalomtól: a kristály intiinsik hibahelyének tekinthető. (A szennyezések hatása lumineszcenciában [38, 39, 55] és a rekombinációs folyamatokban, a V_K -centrum színtelenedési hőmérsékletében [33, 40, 41] jut kifejezésre.

2.3 A V_K^M -centrum

Kétvegyértékű alkáli földfémekkel (Ca, Ba, Sr) szennyezett KCl és KBr kristályok ESR és optikai spektrumát *Hayes és Nichols* [42] vizsgálták részletesen. A szennyezett és száraz jég hőmérsékletén (195° K) röntgenezett KBr és KCl kristályok ESR

jele a V_K -centruméhoz hasonló hiperfinom kölcsönhatásra utal: a hetes vonalcsoport jelentkezett 1:2:3:4:3:2:1 intenzitás arányokkal ha a külső mágneses tér a kocka-élel párhuzamos (27. ábra). A spektrum tehát most is Br_2^- és Cl_2^- típusú molekulaionnak tulajdonítható, azonban a kristály forgatásával kapott spektrumok alapján most csupán három, a kockaélel párhuzamos centrumirány különböztethető meg egymástól. Ellentétben tehát a lapátló irányú V_K -centrummal itt az X_2^- molekulaion $\langle 100 \rangle$ irányú. Erre a centrumra — tekintve, hogy az irodalomban eddig használatos „Hayes és Nichols-féle V_K -típusú centrum” elnevezést túl hosszúnak találtuk — a fémszennyezésre is utaló V_K^M jelölést vezettük be [43, 44].

4. táblázat

Anyag neve	V_K^M -sáv max helye* (nm)	V_K^M Szintelenedési hőm. ($^\circ\text{K}$)	V_2^M -sáv max helye (nm)*
KCl(Ca)	323	236	222
KCl(Sr)	321	233	222
KCl(Ba)	335 és 390	231	222
KBr(Ca)	345	243	275
KBr(Sr)	345	253	275
KBr(Ba)	360 és 410	263	275

* A mérés 77°K -en történt.

Optikai abszorpció mérések a 195°K -en röntgenezett és alkáliföldfémekkel szennyezett KCl, KBr kristályok esetében a szennyezéstől enyhén függő új sávot (sávokat) mutatnak. Az eredményeket Hayes—Nichols mérései alapján a 4. táblázatban foglaltuk össze, ahol feltüntettük a megfelelő szintelenedési hőmérsékleteket és a „tisztá” kristály V_2 -sávjához közeli, de a szennyezett kristályokra jellemző ún. V_2^M -sáv* maximum helyeit is, amelyek — a méréshatáron belül — függetlennek mutatkoznak a szennyezés fajtájától. (Ez utóbbi részletesebb tárgyalására a 3.2-ben, majd a 6. részben kerül sor.)

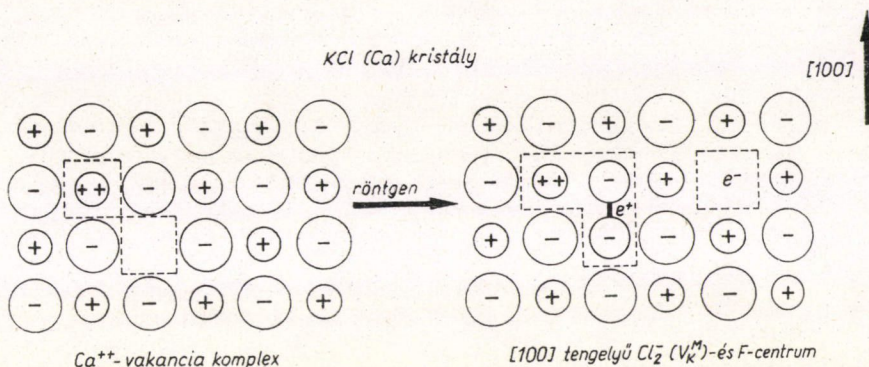
Hasonlóan a V_K -centrumnál alkalmazott eljáráshoz, megnézték az abszorpció változását polarizált fénnel való szintelenítés hatására, ebben az esetben $\langle 100 \rangle$ irányban polarizált (pl. KCl(Ca) esetén 300—400 nm hullámhossz tartományba eső) szintelenítő fény hatására kaptak kettős törést: $\langle 100 \rangle$ irányban polarizált mérőfény alkalmazásakor az abszorpció kb. 1/3 részére csökkent. A szintelenítő fény hatása az ESR spektrumban is megnyilvánult: az $\langle 100 \rangle$ irányú centrumok száma $H_0 \parallel \langle 100 \rangle$ alkalmazásával szintén kb. 1/3 részére lecsökkent.

A hőmérséklet függvényében vizsgálva az összetartozónak vélt rezonancia és optikai spektrumot megállapították, hogy a két jel termikus stabilitása azonos (a 4. táblázatban feltüntetett értékek az ESR spektrum eltűnésére is érvényesek). Reorientáció is mindkét esetben ugyanannál a hőmérsékletnél lép fel (ez általában magasabb, mint a tiszta kristály V_K -centrumához tartozó reorientációs hőmérséklet). Összefoglalva megállapíthatjuk, hogy a vizsgált kristályoknál kielégítő adat áll rendelkezésre arra vonatkozólag, hogy az ESR és optikai spektrum azonos centrumtól származik.

* Ugyancsak a kétértékű fémszennyezésre utaló, általunk bevezetett jelölés.

A V_K^M -centrummal kapcsolatos észrevételek:

a) *Hayes és Nichols* szerint a V_K^M -centrum egy halogén és egy alkali vakancia helyét foglalja el a rácsban. Az $\langle 100 \rangle$ irányú centrum úgy jön létre, hogy egy két-értékű ion — alkáli vakancia pár melletti ($\langle 110 \rangle$ irányú) V_K -centrum a pozitív vakanciába relaxál (13. ábra).



13. ábra
 V_K^M -centrum keletkezése [42]

b) A szerzők megjegyzik, hogy KCl-nál — a viszonylag nagy vonalszélesség miatt — a molekulatengely eltérése az $\langle 100 \rangle$ iránytól 2° is lehet.

c) Feltűnőnek találták, hogy a V_K^M -centrum vonalszélessége KCl-, ill. KBr-ban 9,0, ill. 12,0 gauss, szemben a V_K -centrumra vonatkozó 1,3, ill. 2,5 gauss értékekkel. Ez bizonyos mértékben magyarázható a kristály V_K^M -centrum miatti feszültes állapotával és a centrumnak a pontos $\langle 100 \rangle$ iránytól való eltéréseivel.

d) Az a tény, hogy a V_K^M -centrumokhoz tartozó abszorpciós sáv rövidebb hullámhosszaknál helyezkedik el, mint a megfelelő $\langle 110 \rangle$ irányú V_K -centrumoké, a megváltozott környezetnek a gerjesztési állapotokra való hatásával magyarázható.

e) Figyelmet érdemel az a megállapítás is, hogy más kristályokban, sőt KCl(Cd) rendszerben sem találtak a V_K^M jelenlétére utaló spektrumot. NaCl(Ca) rendszeren az újabban végzett ESR és abszorpciós mérések [45] azt mutatják, hogy speciális úton tisztított és OH^- mentesen növesztett, 80°K feletti hőmérsékleten röntgenezett NaCl(Ca) kristályban mérhető koncentrációban megjelenik a V_K^M -centrum. Valószínűnek látszik, hogy *Hayes és Nichols* vizsgálataikor vagy a kétértékű alkáliföldfém szennyezés kismértékű oldékonysága miatt (pl. Cd esete) nem jelentkezett a V_K^M -centrum, vagy azért, mert más szennyezők (pl. OH^-) jelenléte miatt hatását nem tudta érvényre juttatni.

f) *Hayes* [46] későbbi munkájában megjegyzi, hogy 195°K alatt, így cseppfolyós nitrogén hőmérsékleten besugárzott KCl, KBr kristályokban V_K^M -centrum nem jön létre. Tehát feltételezhető, hogy a röntgensugárzáson kívül egy termikusan aktivált folyamat is szükséges a V_K^M -centrum létrehozásához. Ezt a megállapítást KCl(Ca)-ra — a későbbiek során (6.2-ben) tárgyalásra kerülő saját, más irányú — vizsgálataink is megerősítik.

2.4 Egyéb paramágneses (H -, V_F -, V_I)-centrumok

Az ún. H -sávot cseppfolyós He hőmérsékleten röntgenezett KCl kristályban figyelték meg először [47], majd további optikai [48, 49], ESR [50] és ENDOR [51] vizsgálatok alapján megállapították, hogy a H -centrum (ellentétben Seitz feltételezésével, 9a. ábra) egy halogénhelyen $\langle 110 \rangle$ irányban elhelyezkedő X_2^- halogén molekulaionnak felel meg (9b. ábra). A hozzá tartozó páratlan spin még további kölcsönhatásban van a szomszédos ionokkal; a központi és a külső párok nem ekvivalensek egymással. A másodlagos hiperfinom felhasadásból megállapították, hogy a kötött lyuk az idő legnagyobb részében az X_2^- molekulaionnál tartózkodik és csak 4–10%-ban található a két szélső mag közelében.

A H -centrum az F -centrum komplementerének, kiegészítő centrumának tekinthető; egy ép kristálytartományban rekombinációjuk eredménye: tökéletes rács. A H -centrum KCl-ban 56°K -on már teljesen kipsztlul a kristályból; megállapították, hogy a bomlás elektronleadás (nem pedig elektronokkal való rekombináció) útján történik. A H -centrum szerepe az alacsony hőmérsékletű színezés mechanizmusában rendkívül lényeges.

Az F -centrum antimorfjának a V_F -centrumnak (9b. ábra) felfedezése LiF-ban paramágneses rezonancia módszerrel szintén Känzig nevéhez fűződik [52]. Ezt a centrumfajtát már Seitz megjósolta, bár a V_I -centrumnak tulajdonította (9a. ábra). Akkor jön létre, ha a 77°K hőmérsékleten röntgenezett kristályt 130°K és 220°K intervallumba eső hőmérsékletre melegítjük. A defektelektron a Li hiányhely szomszédságában levő két fluormagnál kötődik: tehát F_2^- -centrumként fogható fel, csak-hogy a hozzá kapcsolódó Li ion hiányhely miatt a molekulatengely „hajlított” (ezért „bent-bond”-centrumnak is hívják). A centrum egy olyan háromszög szimmetriájával rendelkezik, amely valamely $\{001\}$ síkban helyezkedik el és alapvonala ennek megfelelő $\langle 110 \rangle$ irányba mutat. Termikus stabilitása nagyobb, mint a V_K -centrumé a Li hiányhely Coulomb-vonzása miatt. Legújabban V_F -centrumot kétértékűvel szennyezett NaCl kristályban is kimutattak [45].

Mind ez ideig csak LiF-ban tudták létrehozni a paramágneses V -centrumok negyedik fő típusát: a V_I -centrumot [53]. A hiperfinom spektrum analíziséből megállapították, hogy a lyuk állapot három fluornál kötődik; ezek egyenlő szárú háromszög csúcsaiban helyezkednek el valamely $\{001\}$ síkban és az alapvonal $\langle 110 \rangle$ irányú. Ez a centrum egy hiányhely párral és egy alkáli hiánnyal kapcsolatos. A centrumnak megfelelő ESR jel akkor észlelhető, ha 77°K -on a röntgenezett kristályt 20°K -ra lehűtjük. Irreverzibilis változás a centrum koncentrációban csak 130°K -nál következik be, és 205°K -nál a V_I -centrum véglegesen eltűnik. A V_I -centrum modellje megfelel annak a modellnek, amelyet Seitz a V_4 -centrumra javasolt (9a. ábra). (Megjegyezzük, hogy éppen LiF-ban nem található meg a KBr és KCl-ban jelentkező V_4 optikai sávval analóg viselkedésű sáv.)

Nem tulajdonítható pusztá véletlennek az, hogy éppen LiF-ban sikerült eddig a legtöbb V -centrumot ESR módszerrel meghatározni, ui. a természetben csak egyfajta F^{19} izotóp fordul elő (magspinje $1/2$) és így a viszonylag egyszerű, jól feloldott hiperfinom struktúra lehetőséget ad a még komplikáltabb centrumok interpretálására is.

3. *V-típusú centrumok KCl-ban*

A nem paramágneses *V*-típusú centrumok áttekintése különböző kristályokban ezek szövetenyessége és nagy száma miatt túlnőne a dolgozat keretén. Tekintve, hogy méréseinket KCl kristályokon végeztük, ezért csupán ennek *V*-centrumairól adunk áttekintést.

3.1 *Tiszta KCl kristály V-típusú centrumai*

Az ionizáló sugárzás által létrehozott színcentrumok típusai és ezek koncentrációja függ a besugárzás hőmérsékletétől. A régebbi vizsgálatokat technikai okokra visszavezethetően cseppfolyós hélium (4°K), cseppfolyós nitrogén (77°K), száraz-jég (195°K) és szobahőmérsékleten (300°K) végezték. Újabban a viszonylag nagy hőmérséklet-intervallumokat átfogó hőmérséklet-stabilizátorokkal lehetőség nyílt egyrészt a termikus átalakulások folyamatos megfigyelésére, másrészt valamely centrum képződési hőmérsékletének meghatározására.

A *V*-típusú centrumok legnagyobb része diamágneses. Szerencsés körülménynek számít, ha egy ilyen centrum valamely jól ismert paramágneses centrummal hozható kapcsolatba; így összetartozásuk analiziséből következtetni lehet a diamágneses centrum szerkezetére (pl. a V_1 - és H -centrum kapcsolatából a V_1 -centrum szerkezetére [54, 55, 56]). A következőkben röviden ismertetjük a különböző hőmérsékleteken keletkező *V*-típusú centrumokat.

Tekintve, hogy 20°K alatt ionmozgásról nem igen beszélhetünk, ez alatti hőmérsékleten történő röntgenezés hatását jól „konzerválják” a sugárzás hatására keletkezett rács hibák. 4°K közelében főként Frenkel-típusú rács hibák: intersticiumok és hiányhelyek jönnek létre. Az ennek eredményeként kialakuló, egymást kiegészítő (komplementer) centrumok [47, 57, 58, 59, 60, 61] lehetnek:

a) elektronnal közömbösített halogén vakancia (*F*-centrum) és intersticiális halogén atom (*H*-centrum)-pár;

b) halogén vakancia (α -centrum) és intersticiális halogén ion (*I*-centrum)-pár.

Ezek rekombinációja — más hibákat nem véve tekintetbe — tökéletes kristályt eredményez. (A lyuk *H*-centrumon kívül még V_K -centrum formájában is követhetik.)

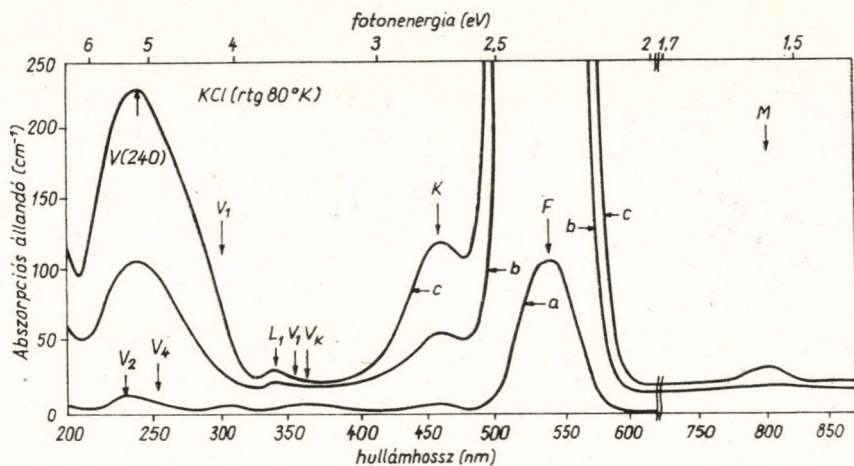
Hosszabb ideig tartó röntgenezés a H' -centrum [62] kialakulásához vezet, amelynek koncentrációja hosszantartó besugárzás után is együtt nő az *F*-centrum koncentrációjával; ez lesz tehát az *F*-komplementer centruma (újabban ezeket *H*-centrumok csoportosulásának vélik [63]).

A kristályt melegítve a közömbösödési folyamat az intersticiális ion, ill. atom nagy mozgékonyasága miatt már 20° , ill. 30°K -on megindul [64, 65, 66].

Az ionizáló sugárzás hatása magasabb hőmérsékleteken már sokkal nehezebben áttekinthető: az *F*-sáv növekedését a besugárzás folyamán a *V*-típusú centrumok változatos sokasága kíséri [25, 26, 47, 67, 68, 69]. Így 80°K körüli hőmérsékleten már rövid ideig (pl. 30 percig) tartó besugárzásnál az *F*-sáv gerjesztett állapotával kapcsolatos *K*-sáv és az *F'*-sáv mellett megjelennek (növekvő hullámhossz szerint rendre) a V_K -, V_1 -, V_7 -, V_4 - és V_2 -sávok (14. ábra) [62]. Hosszantartó besugárzásra a V_2 - és V_4 -sávok egy 240 nm körül megjelenő sávba alakulnak át; jelölése: *V*(240). Megtaláljuk még az *M*-sávot és az *F*-centrum második gerjesztett állapotát jelölő L_1 -sávot is.

Magasabb hőmérsékleten a diffúziós folyamatok számottevően megváltoztatják a sugárzás primer hatására kiváltott folyamatokat. Ez az oka annak, hogy 200°K feletti hőmérséklet-tartományban viszonylag nagy koncentrációban jönnek létre az elsődleges F -aggregátumok: M -, R_1 -, R_2 - és N -centrumok [70]. Itoh [56] mérései szerint a V -sávok közül a 200°K körüli hőmérséklet tartományban legjelentősebb a $V(240)$ -sáv, amely a polarizációs mérések szerint $\langle 100 \rangle$ irányitottsággal rendelkezik.

10.



14. ábra

80°K hőmérsékleten röntgenezett „tisztá” KCl kristály abszorpciója. a) 30 perces, b) 9,5 óras és c) 52 óras röntgenkezései időnek felel meg [62]

Létrejön még ezen a hőmérsékleten a V_2 -sáv is. A $V(240)$ -sávhoz tartozó centrum 21°K -on UV besugárzás hatására H -centrummá alakítható, amiből az előbbi centrum intersticiális jellegére következtethetünk. Ugyancsak erre utal a színezés hatására a folyási határ megnövekedése is [71–79]. Ez azt jelenti, hogy gyakorlatilag az egész színezési tartományban a diszlokációk mozgását akadályozó intersticiumok jönnek létre. Frenkel párok keletkezésére utalnak (5 – 300°K hőmérséklet tartományban) az újabb sűrűség- és rácsparaméterváltozás mérések is [80–83].

Szobahőmérsékleten rövid ideig tartó besugárzás esetén a V_2 -centrum jön létre; hosszabb besugárzási időre pedig a V_3 -sáv kíséri az F -növekedését az UV tartományban. A V_3 -centrumot Lüty [84] javaslatára sokáig az OH^- szennyezés tartalommal kapcsolatos centrumnak tartották. A későbbi szintelenedési [85, 106] és ionvezetőképesség [86] mérések és abszorpciós hullámhosszal kapcsolatos megfontolások* alapján feltételezték, hogy a V_3 -centrum két anion és egy kation helyet elfoglaló Cl_3^- molekula ion.

* Hersh [87] oldatok spektrumát vizsgálta és megállapította, hogy pl. a KCl kristályban a V_2 – V_3 -sávok hullámhossz-tartománya megegyezik az oldatban levő trihalogén (X_3^-) molekula ion abszorpciójával. Igen jó egyezés adódik az oldatban előforduló X_2^- , ill. X_2^0 és a kristálybeli V_K -típusú, ill. V_1 -centrumok abszorpciója között is.

5. táblázat

Centrum	Sáv maximum		Rtg besugárzás ideje (óra)	Keletkezési hőmérséklet (°K)	Eltűnési hőmérséklet (°K)	Struktúra	Irányítottság
	hullámhossz (nm)	mérési hőmérséklet (°K)					
H	330	5	< 10	5	30—50	X_2^- egy halogén helyen	$\langle 110 \rangle^*$
H'	245	5	> 10	5	?	H csoportosulás	?
V_K	365 750	77	~ 1	5—77	130—200	X_2^- két halogén helyen	$\langle 110 \rangle^*$
V_1	356	77	~ 0,5	77	100—115	X_2^0 egy halogén helyen	$\langle 110 \rangle^{**}$
V_2	230	300	~ 0,5	80—300	240—370	X_3^- ?	$\langle 100 \rangle?$
V_3	212	300	> 1	230—?	400	X_3^- két halogén és egy alkáli helyen?	?
V_4	254	77	~ 0,5	77	?	?	?
$V(240)$	240	77	> 6	77—200	?	X_3 diintersticiális?	$\langle 100 \rangle$
V_7	300	77	~ 0,5	77	?	?	?
I	177	5	~ 1	5 77	20—30 200	X^- hiány hely	—
	195	5	~ 1	5	20—30	X^- intersticiális helyen	—

* ESR-val meghatározott irányok.

** Polarizált fényel meghatározott irány (csak 17° K alatt észlelhető).

A szobahőmérsékleti besugárzást kísérő felkeményedést okozó Frenkel-típusú hibáknak megfelelő centrumot az optika ispektrumában mind ez ideig nem találtak; ez a sáv ui. hosszabb besugárzási időkre is együtt nőne az F -sávval, ennek a kritériumnak a V_3 -sáv nem tesz eleget. A tiszta KCl kristályban fellépő és a színezésben szerepet játszó — főleg V -típusú — centrumokat az 5. táblázatban foglaltuk össze; láthatjuk, hogy ismereteink (főleg) a nem paramágneses centrumokra vonatkozólag még eléggé bizonytalanok és hiányosak (amire az adott helyen feltüntetett kérdőjel utal).

3.2 Ca^{++} -mal szennyezett KCl kristály V -típusú centrumai

A kétértékű szennyezések 5° és 80° K közötti hőmérséklet tartományban nem befolyásolják a tiszta KCl-ban fellépő sávok helyzetét, új sáv létrehozását sem eredményezik; hatásuk csupán az F -centrum képződésének mértékére és ennek termikus stabilitására van [62, 88, 89, 90]. (KBr-ban már 80° K-on fellépnek a szennyezésre jellemző új sávok [91]).

A kétértékű alkáliföldfémekkel (Ca, Ba, Sr) szennyezett és 195° K-on besugárzott (50 kV, 50 mA 40 perc) KCl (és KBr) kristályok UV abszorpcióját — mint már a 2.3-ban említettük — Hayes és Nichols [42] mérték először, a 200 nm feletti tartományban (4. táblázat). Az F -, K - és az alkalmazott szennyezés típusra jellemző

V_K^M -sávon kívül kismértékben a V_2^M -sáv jelenik meg; a V_2^M -sáv a rövidebb hullámhosszak felé tolódott a tiszta kristálybeli V_2 -höz képest.

Crawford és Nelson [92] KCl(Ca) kristályban Hayes és Nichols [42] által megállapított hullámhosszaktól egy-két nm-es eltéréssel kapta meg a V_K^M - és V_2^M -sávokat. Hőkezelés és F -fényvel való megvilágítás hatását vizsgálták 195 °K hőmérsékleten*. Megállapították, hogy V_K^M -sáv termikus leépülése a V_2^M -sáv növekedését idézi elő; a kristályt újra lehűtve 195° K-ra és F -fényvel bevilágítva a V_2^M -sáv visszaalakul a V_K^M -sávba. Ellentétben Hayes és Nichols modelljével (13. ábra), ők a V_K^M -centrumot egy izolált pozitív ionhiányhely és egy halogén helyét elfoglaló $\langle 100 \rangle$ irányú Cl_2^- molekulaionnak tekintették. A fenti jelenség értelmezésére pedig feltételezték, hogy a V_2^M -centrum: Cl_2^0 molekula** egy ionhiánypár helyén. A V_K^M termikus bomlásával szerintük tehát egy Cl_2^0 molekula keletkezik, miközben egy elektron szabadul fel:



Az $\langle 100 \rangle$ irányú Cl_2^0 molekula, az F -sávban való megvilágítás hatására szabadbá vált elektron elfogásával visszaalakulhat Cl_2^- azaz V_K^M -centrummá.

Crawford és Nelson kísérleteik értelmezésénél nem tudtak választ adni arra a kérdésre, hogy mi történik a V_K^M -centrum termikus bomlásakor felszabaduló elektronnal. Adások maradnak a V_2^M -sáv részletesebb vizsgálatával: hogyan kapcsolódik ez a szobahőmérsékleten történő röntgenezéshez keletkező sávokhoz. Kétségtelen érdekük, hogy ők javasolják először: a V_K^M -centrum képződése során felszabaduló negatív ionhiányhely F -centrum forrása lehet (l. bővebben a 4.2. pontban).

A szobahőmérsékleten röntgenezett és kétértékű alkáli földfémmel szennyezett KCl kristály abszorpciójára vonatkozólag kevés adat áll rendelkezésünkre. Damm és Tompkins [94] kis koncentrációban ($3 \cdot 10^{-3}$ mol%) Sr^{++} -mal szennyezett kristályok UV abszorpcióját vizsgálva megállapította:

a) Abszorpcióban eltérés adódik a tiszta kristályhoz képest: összetett sáv jön létre, amelynek maximuma 220—227 nm között változik a besugárzási időtől függően.

b) A színezés első szakaszában a hosszabb hullámhosszúságú komponens — általuk V_2 -nek nevezett sáv, a későbbiek folyamán pedig a V_3 -sáv dominál; V_2 -sáv nagysága a bevitt szennyezéstartalomtól függ, a V_3 ettől független.

c) A V_2 -centrum másodrendű kinetikával bomlik mind optikailag (F -fény hatására), mind termikusan; mindkét esetben feltehetőleg ugyanaz a mechanizmus játszik szerepet.

d) F - és V_2 -centrumok szintelenedési görbéje alkalmas faktor segítségével fedésbe hozható. Az F - és V_2 -centrumok tehát szoros kapcsolatban vannak egymással: Az F -ből kiszabaduló elektron nagy valószínűséggel a V_2 -centrumnál esik fogságba.

Liszicin [95] újabb mérései is alátámasztják a b) pontban megállapítottakat. Hasonló eredményt kapott KBr(Sr) esetében is. Mint érdekességet említi meg, hogy NaCl(Ca)-nál éppen az eddig V_2 -nek nevezett sáv helyzete független a szennye-

* Különlegesen tiszta alapanyagból kiindulva KBr(Ca)-on Itoh és Ikeya (93) végeztek hasonló vizsgálatokat.

** A V_2^M -sávnak hullámhossz szerinti megfontolások alapján (87) inkább Cl_2^- molekulaion felel meg.

zéstartalomtól. Liszicin a V_2 -sávot KCl(Sr)- és KBr(Sr)-ban a kristályban a kétértékű szennyezés miatt nagyszámban jelenlevő kation vakanciában helyet foglaló halogénnal hozza kapcsolatba és két defektelektront kötő centrumnak tekinti. A V_2 -sáv eltérő viselkedését NaCl-ben Liszicin úgy magyarázza, hogy itt a halogén befordulása kation vakanciába — a tekintélyes anion-kation rádiusz viszony (1,35) miatt — nehezebb.*

Az eddigi eredmények alapján úgy tűnik, mintha nem lenne összefüggés a Hayes—Nichols és Crawford—Nelson által 200° K hőmérséklet körül röntgenezett. kétértékű alkáli földfémmel szennyezett kristályok abszorpciója és a szobahőmérsékleten történő röntgenezés hatása között. Bár Damm és Tompkins által V_2 -nek nevezett sáv rövidebb hullámhosszaknál jelentkezett mint a tiszta kristályhoz tartozó V_2 -sáv, ezt ők nem tekintették említésre méltó különbségnek. (Ennek oka az alkalmazott szennyezés kis koncentrációja, vagy a kristályban egyéb (pl. OH^-) szennyezőknek a kétértékűeket kompenzáló hatása is lehet.)

Már itt utalunk arra, hogy vizsgálataink egyik eredménye éppen az, hogy elég nagy kalciumkoncentráció mellett ($2 \cdot 10^{-2}$ mol%), szobahőmérsékleti besugárzás esetén — a színezés kezdeti szakaszában — az UV tartományban ugyanaz a V_2^M -sáv jön létre nagy intenzitással, mint amit Hayes—Nichols és Crawford—Nelson jóval kisebb mértékben kaptak 195° K-on történő röntgenezés mellett.

Megemlítjük még, hogy KBr(Ca) rendszeren végzett vizsgálatok szerint [91] a szobahőmérsékleten besugárzott kristályok két stabilis, kétértékű szennyezéssel kapcsolatos sávot mutatnak az UV tartományban (D_1 , ill. D_2) és ezekre polarizációs mérések alapján állítottak modellt: a D_1 $\langle 110 \rangle$ a D_2 pedig $\langle 100 \rangle$ tengelyirányú Cl_3^- molekulaionnak felel meg egy Cl^- ion helyén.

4. A színezés mechanizmusáról

4.1 Tiszta kristály színeződése

Már régen felfigyeltek arra a tényre, hogy az ionizáló sugárzás hatására létrejött F -centrum koncentráció lényegesen nagyobb lehet, mint a termodinamikailag a kristályban jelen levő negatív ionhiányhelyek száma. Azt is megállapították, hogy a röntgensugárzás hatására a kristályok sűrűsége lecsökken; a változást kezdetben Schottky hibahelyek keletkezésével magyarázták [96]. Miután megállapították, hogy a kristály alacsony hőmérsékleten is színeződik, Seitz az egyszerű diffúziós kép helyett a színezhetőséget a diszlokációkkal hozta kapcsolatba. Ez a felfogás is tarthatatlanná vált, amikor bebizonyosodott, hogy igen nagy tisztaságú kristályoknál (5° -tól 80° K tartományban) a színezhetőség nem függ a deformáció mértékétől, a kristály diszlokációtartalmától [97, 98, 99]. Ennek oka lehet ugyan az is, hogy a diszlokáció közvetlen közelében levő F -centrumok e módszerrel kimutathatatlan koncentrációban vannak jelen [100].

Az intersticiális centrumok felfedezése, az ezek létezését alátámasztó sűrűség és keménység mérések más irányba, az alacsony hőmérsékleten különösen egyszerű struktúrájú Frenkel-típusú hibák jelenlétére terelték a figyelmet. Varley [101], Klick

* Ezt a magyarázatot nem tartjuk elfogadhatónak, ui. legújabb vizsgálatok szerint [45] a V_K^M -centrum NaCl(Ca)-ban is létrejön.

[102], Howard és munkatársai [103], Williams [104] és a legutóbbi időben Pooley [105] és Hersh [106] javasoltak különböző lehetőségeket intersticiális halogén keletkezésére. Az utóbbi két szerző szerint a halogén ion egy kétszeresen negatív gerjesztett halogén molekula ($X_2^{=x}$) sugárzás nélküli átmenetekor felszabaduló energia árán kerül intersticiális helyzetbe; az előbbi szerzők elektronjától megfosztott halogén (egyszeresen vagy többszörösen ionizált halogén ion) feltételezéséből indulnak ki. A Williams által módosított Klick-féle mechanizmus inkább KCl-ra nyert igazolást [58, 107, 108] és KJ-ra nem volt alkalmazható, míg a Pooley—Hers-elmélet jól magyarázza azt a tényt, hogy 80°K alatt a KJ gyakorlatilag nem színezhető [109]. A Pooley—Hersh-féle mechanizmust támogató [110] cikkek mellett megjelennek az ezzel ellentmondó dolgozatok [111] is. Jelenleg még nem vagyunk abban a helyzetben, hogy állást foglalhassunk valamelyik elmélet igaza mellett.

Megjegyezzük még, hogy mivel intersticiálisok hosszabb besugárzás esetében magasabb hőmérsékleten is létrejönnek a kristályban, várható, hogy ebben a szakaszban az alacsony hőmérsékletre kidolgozott színezési mechanizmus a szobahőmérsékleten lezajló primér folyamatokat is értelmezni tudja. Erre utal pl. az a jelenség, hogy a H -centrum átmenetileg (10 μsec -os élettartammal) szobahőmérsékleten is létrejön [112]. Azzal a jelenséggel, hogy alacsony hőmérsékleten stabilis centrumok átmenetileg — rövid élettartammal — magasabb hőmérsékleten is létrejönnek, a V_K^M -centrummal kapcsolatban mi is találkoztunk (6.11).

4.2 KCl(Ca) színezésével kapcsolatos előzmények

Gordon és Novick [113] szobahőmérsékleten besugárzott NaCl kristályok röntgenezésénél figyelt fel először a színezési görbe jellegzetes alakjára. Megállapította, hogy ez két szakaszra bontható: gyorsan emelkedő (ún. első, vagy gyors) és a nagyobb dózisoknál fellépő lassan emelkedő (ún. második) szakaszra. Szobahőmérsékleten történő röntgenezésnél az első szakasz meredeksége erősen függ a szennyezéstől, így pl. a kétértékű alkáliföldfém szennyezések megnövelik az első szakasz meredekségét: ezek hatására a kristály könnyebben színeződik. E jelenséget NaCl kristályon kívül főként KCl-on vizsgálták [114, 115]. A 20. ábrán kb. két nagyságrendben eltérő Ca^{++} szennyezést tartalmazó KCl kristályok színezési görbéjét mutatjuk be. Arra, hogy a szobahőmérséklet körüli színezés első szakaszában lényegében más folyamat játszódik le, mint a második szakaszban, a sűrűség [116] és keménység mérések [73, 77] is utalnak. Megállapították, hogy

a) a színezés kezdeti szakaszában a sűrűség lényegesen kevesebbet változik mint a második szakaszban; ez különösen feltűnő volt Ca^{++} szennyezés esetében, amikor is igen kicsiny sűrűségváltozás mellett igen nagy F -centrum koncentráció jelentkezett;

b) a színezés kezdeti szakaszában az F -centrum képződés nem jár lényeges keményedéssel, ami arra utal, hogy a színezés kezdetén intersticiumok nem jönnek létre. Ca^{++} szennyezés esetén itt is változás volt észlelhető: növekvő szennyezés koncentrációval ugyanazon besugárzási dózisa megnő azoknak az F -centrumoknak a száma, amelyekhez tartozó — lyukat stabilizáló — centrumok nem vesznek részt a kristály felkeményedésében.

Már régebben megállapították, hogy a kétértékű szennyező ionok egy része szubsztitúciósan épül be az alkálihalogenid rácsba. Az elektromos semlegesség feltétele megköveteli, hogy a beépült kétértékű ionokkal azonos számú pozitív vakancia

is jelen legyen az egyébként tiszta kristályban.* A kétértékű szennyezés megnöveli tehát a kristályban a mozgékonyabb töltéshordozók (a pozitív ionhiányhelyek számát); a bevitt szennyezés koncentrációra az alacsonyabb hőmérsékletre tartozó — éppen ezek miatt megnövekedett — ionvezetés mértékéből következtethetünk [117, 118].

A kétértékű ionok és pozitív vakanciák vagy izoláltan, vagy — az erős Coulomb-vonzás miatt — ($\langle 110 \rangle$ vagy $\langle 100 \rangle$ irányú) asszociátumokban (komplexekben) helyezkednek el a rácsban a hőmérséklettől függően [118, 119, 120, 121], sőt szobahőmérséklet közelében az asszociátumok nagyobb csoportosulásai (pl. trimerek [122]) is megjelennek.

Minthogy termodinamikai egyensúly esetén a pozitív és negatív vakanciák mőtörtjeinek szorzata valamely kristálynál adott hőmérsékleten állandó [118], kétértékű szennyezés esetén, amikor a szennyező ionokkal azonos számú pozitív vakancia van jelen a kristályban: a negatív ionhiányhely koncentráció jóval kisebb lesz mint tiszta kristályban. E szerint — a tapasztalattal szemben — azt várnánk, hogy kétértékű szennyezés hatására a negatív hiányhelyekkel kapcsolatos centrumok — az F -centrumok — számában csökkenés álljon be. Ez az ellentmondás és a kétértékű szennyezést tartalmazó kristályban található paramágneses centrum: az $\langle 100 \rangle$ irányú V_K^M -centrumnak a felfedezése vezette Crawfordot és Nelsont [92] arra a gondolatra, hogy az F -centrum keltésének mechanizmusát — 195° K hőmérsékleten — összekapcsolja a V_K^M -centrum jelenlétével a kristályban. Szerintük egy izolált pozitív vakancia mellett keltett $\langle 110 \rangle$ irányú V_K -centrum befordul az $\langle 100 \rangle$ irányba, és az így keletkező negatív ionhiányhely a relaxációs energia árán eldiffundál, majd elektront befogva F -centrummá alakul.

Míg NaCl kristálynál valóban sok jel mutat arra, hogy az F -centrum képződés a színezés kezdeti szakaszában az izolált pozitív vakanciákkal van kapcsolatban [77, 123, 124], addig a KCl kristálynál úgy tűnik, hogy inkább a szennyező ion-pozitív vakancia párok játszanak szerepet. Beltrami és munkatársai végeztek ezzel kapcsolatos méréseket [125]. Ionos termoáram (ITC) mérés technikát [126] alkalmaztak és megállapították, hogy KCl(Sr) kristályban röntgenezés hatására a dipolkoncentráció: a Sr^{++} -vakancia komplexek száma az F -centrum koncentrációnak megfelelő mértékben lecsökkent, ami arra utal, hogy F -centrumok keletkezésekor a dipolok száma csökken.

Vizsgálatainkban kiindulópontként elfogadjuk a Crawford- és Nelson-féle mechanizmust a 195° K hőmérsékleten történő színezésre, a V_K^M -centrum keletkezésére. Ugyanekkor tisztázni kívánjuk az OH^- mentesen növesztett KCl(Ca) rendszerben a V_2^M -centrummal kapcsolatos problémákat és szobahőmérsékleten a színezés kezdeti szakaszaiban lejátszódó folyamatokat; célunk, hogy bővebb ismereteket szerezzünk a létrejött diamágneses centrumokról.

* Amennyiben más, negatív (pl. OH^-) ionok is vannak jelen, akkor ezek reagálva a kétvegyértékű szennyezőkkel, kompenzálják a fölös pozitív töltést. Ezért ha az a célunk, hogy a kétértékű szennyezéssel a pozitív ionhiányhelyek számát szaporítsuk, akkor gondoskodnunk kell az alapanyag megfelelő tisztaságáról.

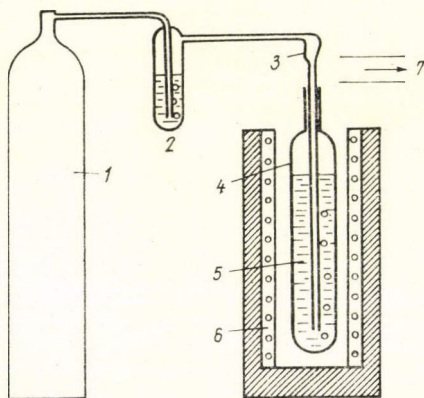
II. Az alkalmazott vizsgálati módszerek és eredmények

5. Kísérleti eljárások

5.1 OH^- mentes KCl egykristály előállítása és szennyezettségének meghatározása

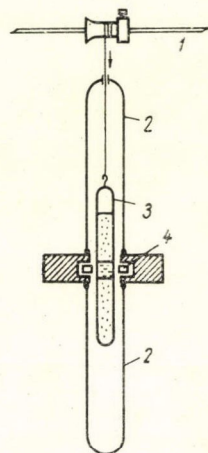
Mivel a kétértékű (Ca^{++}) szennyezés hatását kívánjuk vizsgálni KCl kristály röntgensugárzással történő színezésekor, gondoskodnunk kellett arról, hogy minél tisztább alapanyagból induljunk ki; különösen a kétértékű ionokkal reagáló, leggyakrabban előforduló OH^- szennyezést kellett távol tartani.

Az igen nagy tisztaságú alkali halogenid egykristályok előállítása érdekében intézetünkben bevezetett többféle (kémiai, zónaolvasztásos, vákuum-párolgatásos) módszer közül a KCl-nál hatásosan alkalmazható zónaolvasztásos eljárást használtuk. Ez a módszer akkor alkalmazható, ha az olvadék nem nedvesíti a tégely falát. E célból legtöbbször halogén-gázzal kezelik az olvadékot [127, 128, 27], aminek következtében egyrészt az olvadék az oxigéntartalmú gyökötől (pl. az OH^- -től) mentes lesz, másrészt mivel a halogén az olvadékban oldódik, az olvadék felületi energiája olyan mértékben megváltozik, hogy az a tégelyfalat többé már nem nedvesíti. Eljárásunknál Lebl és Trnkához [129] hasonlóan ehhez széntetrakloridot, kiindulási anyagként pedig p.a. KCl-ot használtunk.



15. ábra

Az olvadék kezelése CCl_4 -el, sematikus ábrázolás. 1. argonpalack; 2. CCl_4 -ot tartalmazó edény; 3. kvarckapilláris; 4. kvarcampulla; 5. olvadék; 6. kályha; 7. elszívó



16. ábra. A zónázó berendezés sematikus rajza. 1. a le- és felfelé mozgást végző tengely; 2. védő üvegcső; 3. kvarcampulla; 4. fűtőspirális

Az anyagot befogadó (suprasyll) kvarc-ampullát először 1000°C hőmérsékleten egy kvarc kapilláris csövön keresztül (99, 98% tisztaságú) argon és (háromszor desztillált) széntetraklorid gázáramával öblögettük át (15. ábra) olvadék nélkül. A széntetraklorid elbomlik és az ampulla falán 5–10 percen belül vékony szénréteg képződik; a gázalakú bomlástermékeket pedig elszívjuk. Ez a kezelés a kvarc felü-

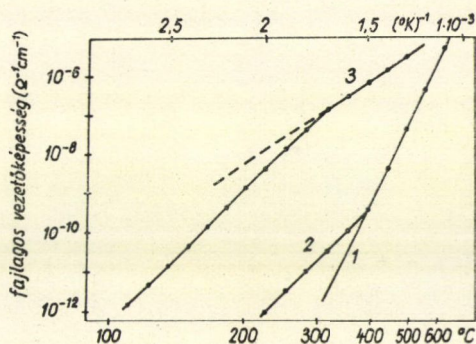
letén levő OH^- gyököket leköti és ezáltal megakadályozza ezeknek az olvadékbba jutását. Az ampullát gázáram mellett hűtjük le, majd KCl porral megtöltjük.

A KCl port az előbbi berendezésben (15. ábra) gázáram mellett megolvasztjuk, majd a (3) kapillárist az ampulla aljára vezetjük, úgy hogy az $\text{Ar} + \text{CCl}_4$ -keverék átjárja az olvadékot. Az eljárás mindaddig tart, amíg az olvadék a kvarcot már nem nedvesíti; ekkor az ampullát leforrasztjuk és kampóval látjuk el, majd az olvadékot a kályhával együtt lehűtjük.

A hideg ampullát azután a függőleges elrendezésű zónázó berendezésbe (16. ábra) helyezzük. A hirtelen hőmérsékletváltozások elkerülése végett a kerámia-testű zónázó kályha fölé és alá üvegsövet illesztünk. Az ampulla süllyedésének sebessége 1 mm/perc volt, felhúzása kb. 10 sec-ot vett igénybe. A zóna szélessége kb. 30 mm, a zónázott hossz kb. 240 mm volt. A vertikális zónázási módszer előnye az olvadék hatékony keverésén kívül az, hogy a gőztéren keresztül történő visszaszennyeződés kismértékű. További előny még az, hogy a többször zónázott anyagból ugyanabban az ampullában megfelelő (1–6 mm/óra) süllyesztési sebességgel, Bridgmann-módszerrel egykristály növeszthető.

A szennyezett kristályokat a fent leírt módon növesztettük, zónázott alapanyagból. A megfelelő mennyiségű szennyezőt az olvadékhoz adtuk hozzá. A zónázó kályhában való növesztés viszonylag homogén szennyezéseloszlást eredményez.

A tisztaság mértékét ionvezetőképesség méréssel állapítottuk meg. A méréshez alkalmazott berendezésben argongáz atmoszférát és nagytisztaságú grafitelektródokat használhatunk. Ideálisan tiszta kristályban csak az egyébként magas hőmérsékleten jelentkező ún. intrinszik ionvezetés tartomány (17. ábra, féllogaritmikus koordináta rendszerben ábrázolt (1) egyenes) lépne fel. Kétértékű szennyezés hatására azonban — tekintve, hogy a tiszta kristályhoz képest jóval nagyobb a mozgékony kationvakanciák száma — alacsonyabb hőmérsékleten is viszonylag jelentős ionáram tapasztalható. Az intrinszik vezetés egyenestől való eltérés — a törési pont helye — tehát függ a szennyezés-tartalomtól; ezért a kisebb meredekségű szakaszt extrinszik tartománynak nevezzük. Ez általában egyenes szakaszokból áll, ami különböző asszociátumok keletkezésére utal [121]. A kétértékű szennyezés koncentrációt az extrinszik tartomány felső szakaszából (pl. 17. ábra 2, ill. 3) határozzuk meg, ahol a szennyezés-vakanciapárok disszociálva vannak. (A vázolt ionvezetési módszerrel kimutatható legkisebb eltérő vegyértékű szennyezés-koncentráció kb. 10^{-6} mol%.) A 20. ábrán bemutatott színezési görbék felvételénél használt kristályok szennyezéstartalmát is ionvezetés méréseiből a [128]-ban közölt kalibrációs görbe felhasználásával határoztuk meg. A kevésbé színezhető viszonylag „tiszta” kristályt 35-szöri zónázás után, a másikat az olvadékhoz 0,1% CaCl_2 hozzáadásával növesztettük; vizsgálatainkat ez utóbbin végeztük.



17. ábra

Ionvezetőképesség a hőmérséklet reciprokának függvényében. (1) intrinszik vezetés egyenese;

(2) 10^{-6} mol % CaCl_2 -hoz tartozó értékek;

(3) $2 \cdot 10^{-2}$ mol % CaCl_2 esetén fellépő ionáram

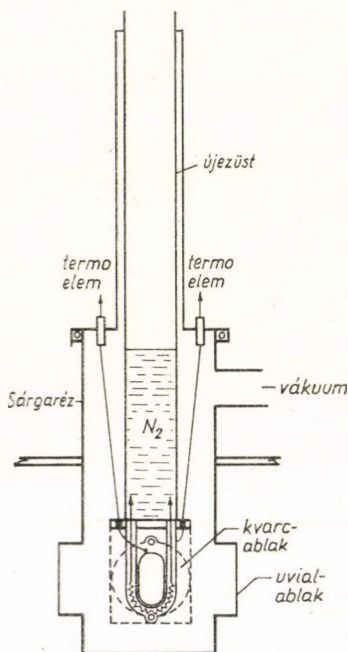
A megfelelő kétértékű szennyezés-tartalmat a 17. ábra 2, ill. 3 görbájéből határoztuk meg; a tiszta kristályra 10^{-6} mol%, a CaCl_2 -dal szennyezettre pedig $2 \cdot 10^{-2}$ mol% adódott.

Kristályaink OH^- mentességét abszorpcióméréssel ellenőriztük: nem jelentkezt az OH^- -nak megfelelő abszorpció 204 nm-nél. Nem volt észlelhető az O_2^- , ill. Ti^+ szennyezésnek (250 nm, ill. 247 nm-nél) megfelelő abszorpciós sáv sem. Eszerint 10^{-5} mol%-nál kisebb koncentrációban lehetnek ezek a szennyezők jelen a kristályban.

5.2 A kriosztát és a hőmérséklet-szabályozó felépítése

Különböző hőmérsékleteken történő színezés és abszorpciós vizsgálatok elvégzéséhez olyan kriosztát és szabályozó építése vált szükségessé, amelynek segítségével 80—380° K (tehát 300° K-t átfogó) hőmérséklet-tartományban tetszőleges, stabil hőmérsékleten tarthatjuk a vizsgálandó kristályt, vagy hőmérsékletét az idő függvényében lineárisan változtathatjuk.

A kriosztát felépítését a 18. ábra mutatja. A köpenyt képező sárgaréz henger az abszorpció mérésekhez 32 mm átmérőjű kvarc ablakkal van ellátva, erre merőlegesen pedig röntgenbesugárzás-hoz vékony uviol ablakokat helyeztünk el. (A berendezés lumineszcencia méréshez is alkalmas.) A henger felső pereméhez csatlakozik 0-gyűrű tömítéssel az újlesztől készült kristálytartó, amelynek belső csővébe kerül a cseppfolyós nitrogén. A vékonyfalú újleszt cső rossz hővezető, úgyhogy az ábrán látható elrendezésben a csatlakozóhelyek (tömítés, termoelem átvezetés) már szobahőmérsékleten maradnak.



18. ábra
80°—380° K hőmérséklettartományban használt kriosztát

A lezárt újleszt cső aljára egy vékonyfalú U-alakban meghajlított sárgaréz cső van forrasztva; ennek alsó felében 2 ohmos szigetelt konstantán fűtőspirál helyezkedik el, amelynek kivezetéseit a 18. ábrán nyíllal jelöltük. A megfelelő nyílással ellátott 1 mm vastag U-alakú csőre forrasztott vörösréz síklapra helyezzük a kristályt, melyet egy vörösréz keret rögzít. A szabályozó termoelem (18. ábrán a jobb oldali) forrasztási helye a fűtőspirál és a hűtőtartály között félúton helyezkedik el, míg a (bal oldali) mérőtermoelem a kristályt rögzítő vörösrézlemezhez van forrasztva. Mérés

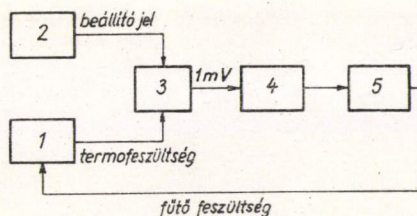
előtt a rendszert evakuáljuk és a hűtőcsövet cseppfolyós nitrogénnel töltjük fel.

A szabályozó blokk-sémája a 19. ábrán látható. A termoelem állandó hőmérsékletű pontját ultratermosztátban $50 \pm 0,05^\circ \text{C}$ -on tartottuk. A termoelem által szolgáltatott feszültség (átlagosan $0,4 \text{ mV}/^\circ\text{C}$) a (3) összehasonlító egységbe jut; ugyanide kerül a beállítójel is (2)-ből. A beállítójelet potenciométerrel leosztott stabilis egyenfeszültség szolgáltatja. A potenciométer tengelyét — a kívánt hőmérséklet-

nek megfelelően — kézzel állíthatjuk, vagy lineáris felfűtés esetén motor meghajtással forgatjuk.

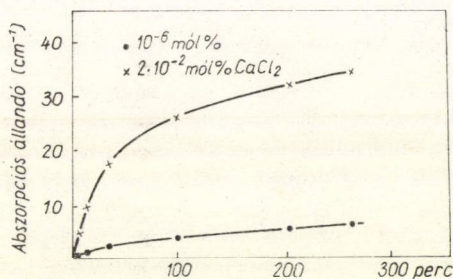
A beállítójel és a szabályozó termoelem által szolgáltatott feszültség összehasonlításakor keletkezett ún. differenciajel a szabályozást végző 2 mV végkitérésű kompenzográfba (4) kerül. A kompenzográf mutatójának mozgása (0,9—1,1 mV közötti tartományban) a meghajtó tárcsa tengelyére erősített kar közvetítésével az ellenállás csúszó kontaktusának mozgását idézi elő; ez vezérli az (5) teljesítményerősítőt 0 és 20 W kimenő teljesítmény között. Úgy állítottuk be a rendszert, hogy egyensúlyi helyzetben a differencia-jel 1 mV legyen; ekkor ui. a kompenzográf mutatója éppen középpállásban van. Ha a differenciajel valami oknál fogva (akár a beállító feszültség, akár a termoelem által szolgáltatott feszültség változása miatt) eltér az 1 mV-os értéktől, a rendszer automatikusan visszaállítja az egyensúlyi állapotot.

A mérések szerint, optimális teljesítmény beállítás mellett a kívánt hőmérsékletet a rendszer $\pm 0,1^\circ\text{C}$ pontossággal 1 órán át tartja. A rendszer előnye még az is, hogy viszonylag kevés cseppfolyós nitrogént, vagy levegőt igényel. A fogyasztás magasabb hőmérsékletek tartásánál nagyobb (pl. szobahőmérsékleten való stabilizálásnál 0,5 l/ó), míg cseppfolyós nitrogén hőmérséklet biztosítása (szabályozás nélkül) óránként csupán 50 cm^3 .



19. ábra

A szabályozó rendszer bloksémája. 1. kriosztát (a szabályozó termoelemmel és fűtéssel); 2. beállító feszültség forrás; 3. összehasonlító egység; 4. kompenzográf; 5. teljesítményerősítő



20. ábra

Két különböző szennyezettségű KCl színezési görbéje

5.3 Egyéb vizsgálati módszerek

5.31 Röntgenbesugárzás és abszorpció mérések

A kristályok röntgenezését szobahőmérsékleten kb. 2000 R/min (150 kV, 10 mA), alacsonyabb hőmérsékleten pedig kb. 500 R/min (40 kV, 5 mA) dózisteljesítmény mellett végeztük. Kísérleteinkben 1—2 mm vastag, mindig frissen hasított kristálylemezeket használtunk; mindegyik példány csak egy mérési ciklusban került felhasználásra. A 20. ábrán látható színezési görbéből megállapítottuk, hogy a vizsgálataink tárgyát képező $2 \cdot 10^{-2}$ mol %-ban CaCl_2 -dal szennyezett kristályok egy óránál rövidebb ideig történő besugárzása esetén még a kezdeti, gyors színezési szakaszon belül maradunk. Megállapításaink is erre a tartományra vonatkoznak.

Az abszorpció méréseket UNICAM Sp-700 spektrométerrel végeztük, amelynek egyik sugárútjába helyeztük a kriosztátot.

A kristályok fehér fénnel való megvilágítására volfram lámpa (kb. $0,1\text{ W/cm}^2$ intenzitású) fényét használtuk. Azért használtunk fehér fényt, hogy csökkentsük az egyéb F-típusú centrumok képződését.

5.32 ESR mérés

ESR módszerrel a $(h\gamma = g\beta H_0)^*$ rezonancia-feltétel teljesülésekor az anyagminta által a mikrohullámú térből abszorbeált mágneses energiát detektáljuk. A rezonancia alkalmával felvett teljesítmény a dinamikus mágneses szuszeptibilitás imaginárius részével (χ'') arányos. Alkalmas berendezés segítségével — a mágneses tér modulációjával és fázisérzékeny ún. Lock in detektor alkalmazásával — ennek első deriváltját regisztráljuk.

A mérések a KFKI-ban levő JEOL YES-3B spektrométeren történtek. A készülék öt főegységből áll;

- a) elektromágnes a homogén $H_0 \sim 3000$ gauss előállítására;
- b) mikrohullámú forrás;
- c) üregrezonátor, amelyben elhelyezett anyagminta rezonancia esetében a mikrohullámú teljesítményt abszorbeálja;
- d) detektor a rezonancia abszorpció jelzésére;
- e) a jeleket regisztráló berendezés.

A készülék felbontóképesége (100 kc moduláció frekvencia esetében): 0,12 gauss; érzékenysége $5 \cdot 10^{11}$ spin/gauss.

A mérésekhez kb. $2 \times 2 \times 30$ mm méretű kristályokat használtunk. A méretet az üregrezonátor szabja meg. A kristály megfelelő orientációjának beállításához egy stabilis függőleges tengely körül kellett forgatni a kristályt. Erre a célra esztergált rézrudat használtunk, melynek végére a megfelelő alakra hasított kristályt szilikonszírral ragasztottuk fel. A már felfüggesztett kristályt azután a kívánt hőmérsékleten és ideig röntgenezzük. A besugárzott kristálynak a megfelelően hőszabályozott üregbe helyezése kényes feladat volt, minthogy ezt a műveletet egy kiválasztott (pl. a kocka-éllel párhuzamos) irány megtartása mellett sötétben kellett végezni. A forgató berendezés csavar segítségével rögzítődik az üreghez, a rézrudat — amin a kristály függ — rugós befogóval rögzítjük. A forgatás pontossága ± 1 fok.

6. KCl(Ca)-on végzett mérések eredményei és azok értékelése

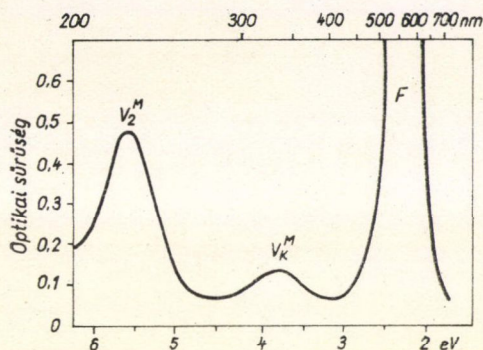
6.1 Kísérleti eredmények

6.11 Szobahőmérsékleten történő röntgenezés hatásának vizsgálata és a V_2^M -centrum oszcillátorerősségének meghatározása

A 21. ábra szobahőmérsékleten röntgenezett (5 perc) és ugyancsak szobahőmérsékleten mért, $2 \cdot 10^{-2}$ mol% koncentrációban CaCl_2 -ot tartalmazó KCl kristályok abszorpciós színeképét mutatja. A színeképben három sáv figyelhető meg, a maximumok 556, 328 és 226 nm-nél fekszenek. A kristályokat 93°K -ra hűtve a sávmaximumok 540, 323, ill. 222 nm-re tolódnak el. Az első az F -sáv, a másik kettő defektelektronsáv; az utóbbiakhoz tartozó hullámhosszak megegyeznek Hayes és

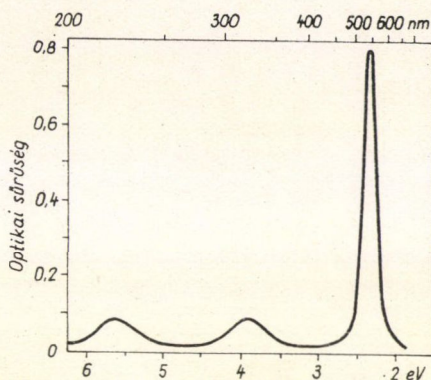
* h = Planck-állandó
 γ = mikrohullámú tér frekvenciája
 g = g -faktor
 β = Bohr-magneton
 H_0 = külső mágneses tér erőssége

Nichols [42] által KCl(Ca)-ban — 196°K hőmérsékleten történő röntgenezéskor — kapott V_K^M -, ill. V_2^M -sávok (l. 4. táblázat) helyzetével. Különbség adódott azonban a sávok intenzitás viszonyában: míg 196°K -on röntgenezve a kristályt a V_K^M -sáv dominál, addig szobahőmérsékleten a V_2^M -sáv jelentősebb. Amennyiben a szobahőmérsékleten rövid ideig (5 perc) röntgenezett kristályt azonnal 93°K -ra — a mérés hőmérsékletére — hűtjük, a V_2^M - és V_K^M -sávok egyforma nagyságnak mutatkoznak (22. ábra). Ebből — a 22. ábra összevetésével — arra következtethetünk,



21. ábra

KCl(Ca) kristály abszorpciós spektruma. Röntgenezés (5 perc) és mérés szobahőmérsékleten



22. ábra

KCl(Ca) kristály optikai abszorpciós spektruma. 5 perces szobahőmérsékleten történő röntgenezés után lehűtve és mérve 93°K -on

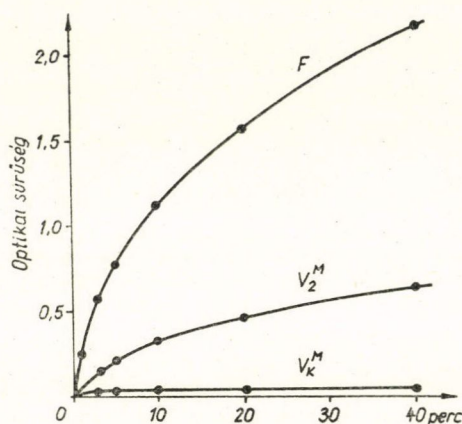
hogy a V_2^M -sáv kifejlődésének a szobahőmérséklet kedvez. ESR jelet szobahőmérsékleten történő besugárzásakor nem kaptunk. (Tiszta kristály esetében az irodalommal egyezésben a V_2 - és V_3 - sávokat kaptuk: az 5. táblázatban az ezekre vonatkozó eltűnési hőmérséklet értékek: saját mérési eredmények.)

A 23. ábrán az egyes sávok növekedését tüntettük fel a besugárzási idő függvényében. Szembetűnő, hogy a V_K^M -sáv viszonylag kis optikai sűrűségnél éri el telítési értékét, ami arra utal, hogy ezt a sávot szobahőmérsékleten instabilis centrumfajta hozza létre. Ha a színezett kristályt szobahőmérsékleten sötétben „pihentetjük”, a V_K^M -sáv egy óra alatt gyakorlatilag teljesen eltűnik (abszorpciós állandója: $\alpha_{V_K^M} = 0$). Ezután a kristály az F - és a V_2^M -sávok csökkenése mellett színtelenedik. E színtelenedési folyamatot kb. 100 órán át követtük és a sávmaximumokban mért összetartozó α_F és $\alpha_{V_2^M}$ abszorpciós állandópárokat a 24. ábrán tüntettük fel (háromszög alakú jelek). A pontok origóba futó egyenesen fekszenek, ami arra utal, hogy a V_2^M - és az F -centrumok között rekombináció megy végbe anélkül, hogy a folyamatban más centrum is résztvenne. A 24. ábra szerint:

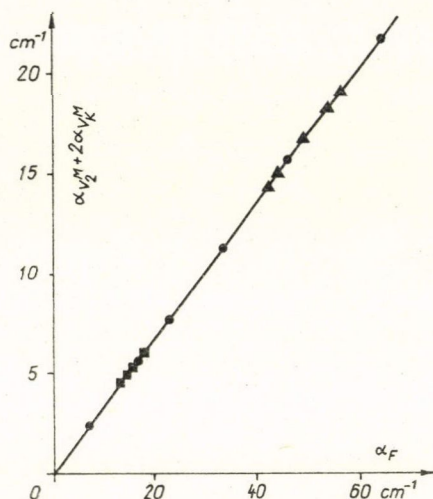
$$\frac{\alpha_F}{\alpha_{V_2^M}} \approx 3 \quad (\alpha_{V_K^M} = 0). \quad (5)$$

Amennyiben a pihenés kezdeti szakaszától — amikor V_K^M -centrumok is jelen vannak a kristályban — figyeljük az abszorpciós állandók változását a pihenési idő függvényében (25. ábra), akkor azt tapasztaljuk, hogy a V_K^M -sáv csökkenésével

egyidőben a V_2^M -sáv növekszik. Ez a körülmény azt a gondolatot veti fel, hogy pihenéskor a V_K^M -centrumokból V_2^M -centrumok képződhetnek. A V_K^M -centrumokat a V_2^M -centrumok „előfutárjainak” tekinthetjük. Elképzelésünket alátámasztja a következő megfontolás is, amely egyúttal kvantitatív összefüggést szolgáltat a V_K^M - és



23. ábra
Az F -, V_2^M és V_K^M -sávok növekedése
a besugárzási idő függvényében
szobahőmérsékleten



24. ábra
Abszorpciós állandók közötti összefüggés
szobahőmérsékleten. ● a színezés folya-
mára, ■ az 1 órán belüli és ▲ az 1 órán
túli szintelenedésre vonatkozik

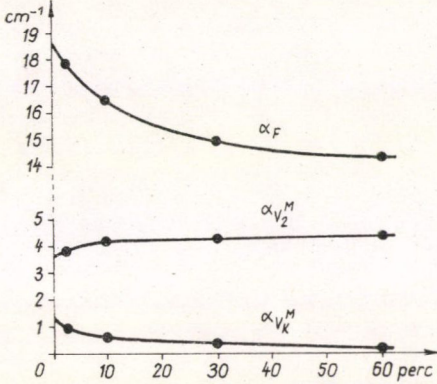
ennek átalakulása révén létrejövő V_2^M -sávokhoz tartozó abszorpciós állandók között. Ha ui. a V_K^M -centrumok V_2^M -centrumokká képesek átalakulni, akkor az $\alpha_{V_K^M}$ abszorpciós állandóval jellemzett V_K^M -sáv valamilyen $K\alpha_{V_K^M}$ abszorpciós állandóval jellemezhető V_2^M -sávval egyenértékű. Kérdés tehát, hogy található-e olyan K , amely minden esetben kielégíti az alábbi egyenletet:

$$\frac{\alpha_F}{\alpha_{V_2^M} + K\alpha_{V_K^M}} \approx 3. \quad (6)$$

A (6) az (5)-nek általánosítása arra az esetre, amikor a színek V_K^M -sávot is tartalmaz. A 23. és 25. ábrákon közölt mérési eredmények alapján (6) akkor teljesül, ha $K=2$. Ezt a megállapítást szemléltetik egyébként a 24. ábrán körökkel, ill. négyzetekkel jelölt pontok is, amelyeket a 23. és 25. ábrák felhasználásával rajzoltunk be, a K értékét 2-nek véve.

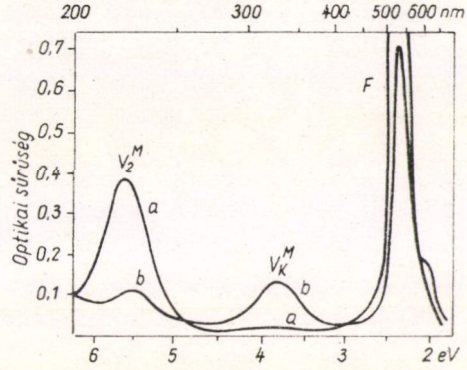
Elfogadva a V_K^M -centrumra az egydefektelektronos modellt, a továbbiakban feltételezzük, hogy a V_2^M -centrum két defektelektront tartalmaz, és hogy egy V_2^M -centrum két V_K^M -centrum asszociációjának eredményeként jön létre. Azt is mondhatjuk, hogy egy V_K^M -centrumhoz partnerként egy F -centrum, egy V_2^M -centrumhoz pedig két F -centrum tartozik. Feltételezéseink összhangban állnak azzal a tapasztalattal, hogy a V_K^M -centrum para-, a V_2^M -centrum pedig diamágneses. Az a körülmény, hogy Hayes

és Nichols [42] vizsgálatai során a V_K^M -hez tartozó abszorpció (323 nm-nél) már szobahőmérséklet alatt eltűnt (4. táblázat), valószínűleg kísérleti eljárásukból következik. Az is lehetséges, hogy más volt náluk a kétvegyértékű fémszennyezés koncentrációja, a kristályok OH^- -ionokat is tartalmazhattak, hiszen előzőleg azokat magasabb hőmérsékleten temperálták.



25. ábra

Az F -, V_2^M - és V_K^M -sávok maximumában mért abszorpciós állandó változása a pihenési idő függvényében szobahőmérsékleten



26. ábra

KCl(Ca) kristály abszorpciós spektruma a) szobahőmérsékleten röntgenezett és kb. 1 óráig pihentetett kristály; b) 1 percig szobahőmérsékleten fehér fénnel történt megvilágítás után.

A mérések 93°K -on történtek

Az előzőekben a V_K^M -centrumoknak V_2^M -centrumokká való spontán átalakulásáról volt szó. Várható azonban, hogy az ellentétes irányú folyamat is végbemegy, ha a két defektelektronos V_2^M -centrumok elfognak egy elektront. E célból a szobahőmérsékleten röntgenezett és kb. 1 óráig pihentetett kristályt ugyancsak szobahőmérsékleten kb. 1 percen át fehér fénnel világítottuk meg. Az abszorpciós színképet a 26. ábra szemlélteti, ahol az a görbe a pihent, a b görbe pedig a megvilágítás utáni állapotra vonatkozik. Az ábra azt mutatja, hogy a V_2^M -sáv rovására a várakozásnak megfelelően, valóban megjelenik a V_K^M -sáv.

A fentieket elfogadva kiszámíthatjuk a V_2^M -sávnak az F -sávra vonatkozó oszcillátor erősségét. E célból írjuk fel a Smakula-féle formulát arra az esetre, amikor a kristály az F -centrumokon kívül csak V_2^M -centrumokat tartalmaz. A szokásos jelöléseket alkalmazva:

$$N_F f_F = C_F H_F \alpha_F \quad (7)$$

és

$$N_{V_2^M} f_{V_2^M} = C_{V_2^M} H_{V_2^M} \alpha_{V_2^M}. \quad (8)$$

Tekintetbe véve, hogy $N_F = 2N_{V_2^M}$, majd a 6. táblázatban megadott értékek felhasználásával a V_2^M -sáv oszcillátor erősségére (7) és (8)-ból a következő összefüggés adódik:

$$f_{V_2^M} \approx 1,16 f_F, \quad (9)$$

ahol f_F helyére az 1. táblázat valamelyik értékét — vagy azok átlagértékét — helyettesíthetjük.

6. táblázat

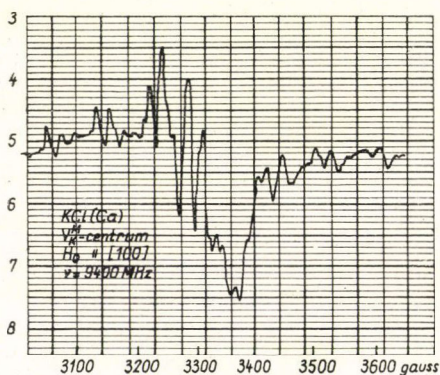
Centrum	A sáv helye 20 °C-on (nm)	Félerékszélesség (eV)	Abszorpciós állandó (cm ⁻¹)	Törésmutató (n)	$\frac{n}{(n^2+2)^2}$
F	556	0,36	51	1,49	0,0837
V_K^M	226	0,7	17	1,63	0,0752
V_K^M	328	0,65	8,5*	1,53	0,812

* Számolt érték.

6.12 A 195° K-on röntgenezett kristály vizsgálata és a V_K^M -centrum oszcillátorerőségeinek meghatározása

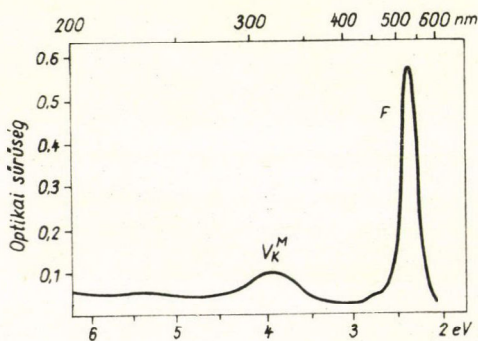
195 °K-on röntgenezett kristály ESR spektrumát mutatja a 27. ábra; jól felismerhető a V_K^M -centrumra jellemző struktúra (2.3 rész).

$H_0 \parallel \langle 100 \rangle$ irány mellett a centrumok tengelye 2/3 részben 90°-os, 1/3 részben pedig 0°-os szöget zár be a külső térrel. A 27. ábrán látható spektrumot is ilyen beállítás esetén vettük fel. A spektrum közepetáján tömörülő vonalak a mágneses térrel 90°-ot bezáró centrumoktól származnak. A szélesebb mágneses tér tartományt átfedő vonalakat a térrel $\vartheta = 0^\circ$ -os szöget bezáró, kisebb koncentrációban jelenlevő centrumok adják. Ezeknél jól felismerhető a Cl_2^- molekulaionra jellemző 1:2:3:4:3:2:1 vonalintenzitás-arány. A spektrum közepét még az F-centrum nagy jele is bonyolítja. A kisebb koncentrációt jelző közbülső jelek az izotópeffektusból származnak.



27. ábra

V_K^M -centrum ESR spektruma KCl(Ca)-ban
 H_0 párhuzamos [100] mellett



28. ábra

KCl(Ca) kristály abszorpciós centruma 193 °K
-on való röntgenezés után. Mérés 93° K-on

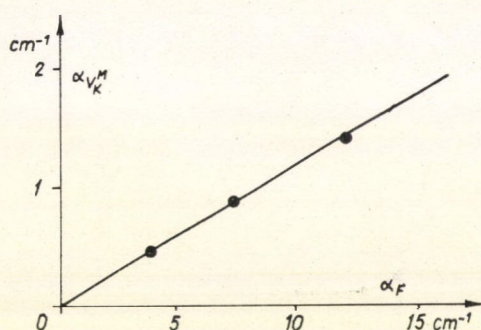
Abszorpcióban (93° K-on mérve) az F-sávon kívül csak a V_K^M -sáv volt megfigyelhető (28. ábra). A dózis növelésével a V_K^M -sáv az F-sávval együtt nő. A 29. ábrán feltüntetjük az összetartozó abszorpciós állandó párokat, amelyek origóba futó egye-

nesen fekszenek; az egyenes iránytangense azonban eltér a 24. ábra iránytangensétől. A 29. ábra szerint:

$$\frac{\alpha_F}{\alpha_{V_K^M}} \approx 8,5 \quad (\alpha_{V_2^M} = 0). \quad (10)$$

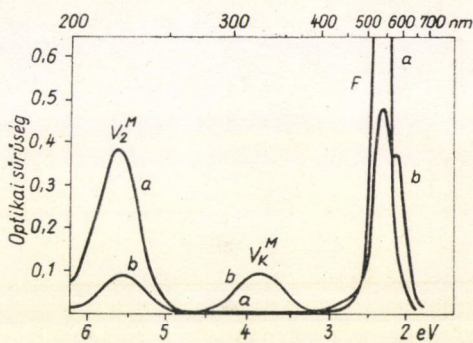
Láthatjuk, hogy a (10) a szobahőmérsékleten röntgenezett, de 93° K -on történt mérésre vonatkozó (6) alakú kifejezés speciális esete, amikor $\alpha_{V_2^M} = 0$. A (10) lehetővé teszi a V_K^M -sáv oszcillátor erősségének meghatározását. Tekintve, hogy a V_K^M -centrum egyetlen defektelektront tartalmaz kell, hogy $N_F = N_{V_K^M}$ legyen, akkor a Smakula-formula és a 7. táblázat értékei alapján a következő összefüggés adódik:

$$f_{V_K^M} \approx 0,31 f_F. \quad (11)$$



29. ábra

Összefüggés az F - és V_K^M -sáv maximumában mért abszorpciós állandók között 193° K hőmérsékleten röntgenezett kristály esetén. Mérés 93° K -on



30. ábra. KCl(Ca) kristály abszorpciós spektruma a) szobahőmérsékleten röntgenezett, kb. 1 óráig át pihentetett kristály; b) 195° K -on 5 perc fehér fénnel való megvilágítás után. Mérések 93° K -on történtek

A V_K^M -sáv oszcillátorerősségét indirekt módon, a szobahőmérsékleten történő besugárzás eredményeit (6. táblázat) felhasználásával, a V_2^M -centrumok közvetítésé-

7. táblázat

Centrum	A sáv helye 93° K -on (nm)	Félértékszélesség (eV)	Abszorpciós állandó (cm^{-1})	Törésmutató (n)	$\frac{n}{(n^2+2)^2}$
F	540	0,22	10	1,49	0,0837
V_K^M	323	0,6	1,18	1,53	0,0812

vel is meghatározhatjuk. E célból írjuk fel a Smakula-féle formulát egy adott V_K^M -sávra vonatkozólag:

$$N_{V_K^M} f_{V_K^M} = C_{V_K^M} H_{V_K^M} \alpha_{V_K^M}. \quad (12)$$

Ez a V_K^M -sáv (a 24. ábrából adódóan) olyan V_2^M -sávval egyenértékű, amelyre a következő formula írható fel:

$$N_{V_2^M} f_{V_2^M} = C_{V_2^M} H_{V_2^M} 2\alpha_{V_K^M}. \quad (13)$$

Ha még figyelembe vesszük, hogy $N_{V_K^M} = 2N_{V_2^M}$ és felhasználjuk a 6. táblázat megfelelő adatait, a V_K^M -sáv oszcillátorerősségére (12) és (13)-ból az alábbi összefüggések adódnak:

$$f_{V_K^M} \approx 0,25 f_{V_2^M}, \quad (14)$$

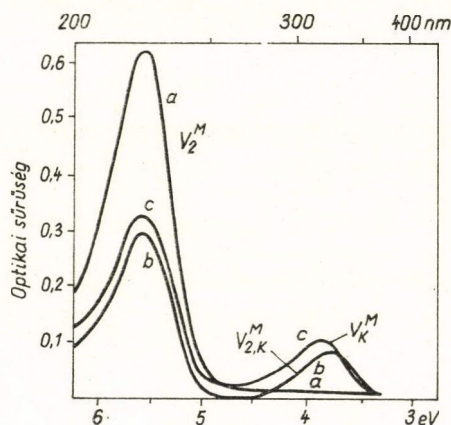
ill. felhasználva (9)-et:

$$f_{V_K^M} \approx 0,29 f_F. \quad (15)$$

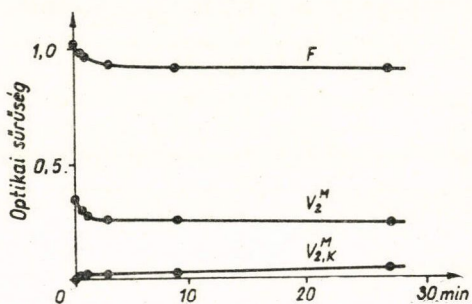
(15) jó egyezést mutat a közvetlen úton meghatározott (11) alatti értékkel.

6.13 A V_2^M , V_K^M , $V_{2,K}^M$ átalakulás vizsgálata

A szobahőmérsékleten stabilis V_2^M -centrumok fehér fény hatására 195° K -on átalakíthatók V_K^M -centrumokká. Ezt szemlélteti a 30. ábra. Az a görbe szobahőmérsékleten röntgenezett és pihent kristályra vonatkozik, a b görbe pedig a 195° K -on 5 perces fehér fénnel való besugárzás utáni állapothoz tartozó abszorpciót mutatja. Mindkét görbe felvétele 93° K -on történt.



31. ábra. KCl(Ca) kristály abszorpciós spektruma a) szobahőmérsékleten röntgenezett kb. 1 óráig pihentetett kristály; b) 93° K -on végzett 5 perces fehér megvilágítás után; c) az előző mérést követő 233° K -ig való melegítés után (5 perc). A mérések 93° K -on történtek



32. ábra
Az F -, $V_{2,K}^M$ -sávok változása a fehér fénnel való megvilágítási idő függvényében 93° K -on

Ha 93° K -on világítjuk meg fehér fénnel a szobahőmérsékleten röntgenezett kristályt, a V_2^M -sáv nem V_K^M -sávvá, hanem egy új, általunk $V_{2,K}^M$ -mel jelölt sávva alakul, amely 335 nm -nél fekszik. Ezt szemlélteti a 31. ábra, amelynek a görbéje a kiindulási, b görbéje pedig a megvilágítás utáni állapotra vonatkozik. 93° K fölé melegítve a kristályt ez az új sáv átalakul a V_K^M -sávvá (c görbe). A 32. ábra az egyes sávok maximumában mért optikai sűrűség változását mutatja a fehér megvilágítás idejének függvényében.

Mivel felmerült a gyanú, hogy a V_2^M -centrum és elektron találkozása alacsony (93° K) hőmérsékleten páratlan spinű centrumot eredményez, vizsgáltuk a szoba-

hőmérsékleten röntgenezett és 93°K -on fehér fénnel megvilágított kristály ESR spektrumát. A kísérlet során egy lyukat kötő centrumnak tulajdonítható jel nem volt kimutatható.

6.2 Diskusszió

A bemutatott kísérletek alapján következtetéseket kívánunk levonni a KCl(Ca) rendszer színezési mechanizmusára vonatkozólag.

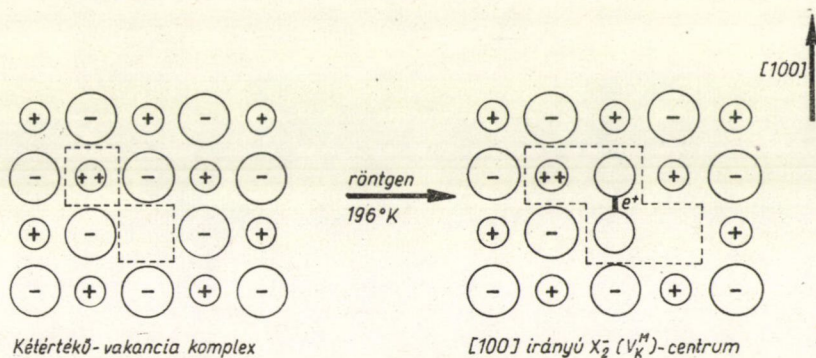
1. Kiindulásul szolgáló megállapításaink, ill. feltevéseink a következők:

a) kristályaink OH^- és egyéb oxigéntartalmú szennyezéseket az abszorpció és ionvezetés mérések tapasztalata szerint megfigyelhető mennyiségben nem tartalmaznak (5.1 fejezet). Meggondolásainkban tehát ezek jelenlétével nem számolunk.

b) A színeződés dózisfüggése (20. ábra), valamint a (6.1-ben) bemutatott abszorpciós színeképek egyaránt arra utalnak, hogy vizsgálataink a szennyezéssel kapcsolatos gyors színezési szakaszra vonatkoznak. Feltételezzük tehát, hogy ebben a szakaszban a színeződési folyamat csak a Ca^{++} ionokhoz, ill. beépülésük következtében létrejött rácshibákhoz kapcsolódik.

c) Mások eredményei és saját méréseink is azt sugallják, hogy az alkáli halogenidekben magasabb hőmérsékleten csak olyan V-típusú centrumok tekinthetők stabilisnak, amelyek lokálisan semlegesek. Ez látszik érvényesnek KCl(Ca) rendszerben szárazjég hőmérséklete felett. Erre utalnak a dolgozatban nem részletezett depolarizációs áramokra vonatkozó méréseink is, amelyek szerint a dipólus jellegű kalcium-vakanciakomplexek 195°K felett mozgékonyakká válnak.

2. Beltrami és munkatársai [125] eredményei és saját méréseink alapján a V_K^M -centrumot KCl(Ca) rendszerben — Crawford és Nelson [99] javaslatával ellentétben — Ca^{++} -hoz kötöttnek tekintjük és véleményünk szerint a színezés szobahőmérsékleten két lépésből tevődik össze. Az elsőben a szennyező vakanciakomplex.

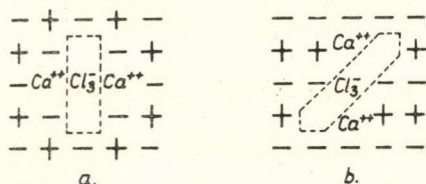


33. ábra

V_K^M - és F-centrum egyidejű keletkezése [42, 92]

ből a Crawford és Nelson által javasolt vakanciacsere révén egy Ca^{++} ionból és egy vakanciapárban $\langle 100 \rangle$ irányítással elhelyezkedő Cl_2^- molekulaionból álló centrum, a V_K^M -centrum alakul ki, miközben a mechanizmus által termelt negatív vakanciánál egy F-centrum keletkezik (33. ábra). A V_K^M -centrum lokálisan semleges, de szoba-

hőmérsékleten rövid élettartamú. A második lépésben két V_K^M -centrum asszociál egy V_2^M -centrummá. Az asszociáció során kialakuló V_2^M -centrumot két Ca^{++} ion melletti két pozitív, valamint egy negatív vakanciában elhelyezkedő Cl_3^- molekula-ionból álló centrumnak tekintjük. Ez a centrum lokálisan semleges, két defektelektront tartalmaz és ESR jelet nem ad.



34. ábra

A V_2^M -centrum lehetséges modellje: a) $\langle 110 \rangle$ irányban elhelyezkedő két anion és egy kation helyét elfoglaló Cl_3^- molekulaion; b) $\langle 111 \rangle$ irányú centrum

Szimmetrikus képződmény esetén a Cl_3^- molekulaion a rácsban vagy a 34a. ábrán szemléltetett $\langle 100 \rangle$ irányú helyzetet veheti fel, vagy valamely $\langle 111 \rangle$ irányban helyezkedik el az (110) síkban (34b. ábra). A két helyzet különböző valószínűséggel fordulhat elő, és abszorpciójuk is eltérő lehet a különböző kristályokban. Ellenkéntben a már említett $\text{KBr}(\text{Ca})$ rendszerrel [91] a $\text{KCl}(\text{Ca})$ -ban egyetlen V_2^M -sáv figyelhető meg, tehát csak az egyik lehetőség valósul meg számottevő valószínűséggel.

Tekintve, hogy polarizációs vizsgálatokat az UV -tartományban nem állt módunkban végezni, így nem tudtuk eldönteni, melyik esettel állunk szemben.

A V_2^M -centrumok kialakulása a V_K^M -centrumokból termikusan aktivált folyamat. Méréseinkben eléggé alacsony hőmérsékleten, pl. 195°K -on végzett röntgenezéskor a V_K^M -centrumok átalakulása V_2^M -centrumokká nem volt megfigyelhető. Éppen ez a tény tette lehetővé a V_K^M -centrum oszcillátorerősségének direkt meghatározását. (Hayes és Nichols vizsgálataiban [42] megjelenik ugyan a viszonylag kicsiny V_2^M -sáv, az említett szerzők azonban lényegesen nagyobb dózist alkalmaztak.)

Úgyszintén 195°K -nál, vagy ennél magasabb hőmérsékleten megy végbe a V_2^M -centrumnak a V_K^M -centrummá való átalakulása is fehér fénnel való megvilágítás hatására. Elképzelésünk szerint a folyamat két szakaszból áll. Először a V_2^M -centrumnál fogságba esik az F -centrumból kiváltott elektron. A folyamat második szakasza csak akkor megy végbe, azaz V_K^M -centrum csak akkor képződik, ha az elektrontöbblettel rendelkező V_2^M -centrum az F -centrumból visszamaradt negatív vakancia felhasználásával disszociálni képes. Végsősoron tehát egy V_K^M -centrum és egy Ca^{++} -vakanciapár keletkezik. A folyamat második szakasza csak elég magas hőmérsékleten mehet végbe, amikor az ionmozgáshoz szükséges termikus energia is rendelkezésre áll. Ha a kristályt 93°K hőmérsékleten világítjuk meg fehér fénnel, a folyamat második szakasza gyakorlatilag elmarad: mérhető V_K^M -sáv nem alakul ki. Megfigyelhetőkké válnak viszont a V_2^M -centrumokból elektronfelvétel révén létrejött, lokálisan negatív V -típusú centrumok; ezeket neveztük el $V_{2,K}^M$ -centrumoknak. Ha a kristály hőmérsékletét növeljük, a $V_{2,K}^M$ -centrumok 93°K felett a modellel egyezésben V_K^M -centrumokká alakulnak.

A $V_{2,K}^M$ -centrumoknak a modell szerint ESR jelet kellene adniok. Ezirányú kísérleteink (6.13) valószínűleg ezért nem hozták meg a várt eredményt, mert nem sikerült a $V_{2,K}^M$ -centrumokat kellő koncentrációban előállítanunk (31. ábra).

ESR méréseink során sikerült reprodukálnunk (27. ábra) Hayes és Nichols [42] 195°K -on nyert eredményeit, jól mérhető jelet azonban csak több órás besugárzás után kaptunk. Cseppfolyós nitrogén hőmérsékleten viszont (szintén többórás besugárzás esetén) Hayes [46] megállapításával egyezésben a tiszta kristályra jellemző ESR jelet (10. ábra) és a 365 nm-es abszorpciós sávot (3. táblázat) kaptuk meg;

mindkettő fehér fény hatására elűnik. A 93°K esetünkben elég alacsony hőmérséklet ahhoz, hogy ne szennyezéshez kötött színezési mechanizmus, hanem zömmel a tiszta kristályban végbemenő folyamatok érvényesüljenek. A szennyezéshez kapcsolódó mechanizmus KCl(Ca) rendszerben 93°K -on befagyottnak tekinthető.

Összefoglalás

Célul tűztük ki a KCl(Ca) rendszerben röntgenezés hatására szobahőmérsékleten keletkező V -típusú centrumok tanulmányozását.

A vizsgálatokban felhasznált kristályokat az intézetünkben kifejlesztett eljárás szerint tisztítottuk és OH^- mentesen növesztettük. Az így előállított kristályokban a kétértékű alkáli földfém-szennyezések koncentrációja kb. 10^{-6} mol% volt. A visszaszennyezés 0,1 mol% CaCl_2 hozzáadásával történt. A vizsgálatok során a kristályok fényabszorpciós és ESR spektrumát tanulmányoztuk 93°K -tól szobahőmérsékletig terjedő tartományban az ún. gyors színezési szakaszban.

A szobahőmérsékleten röntgenezett kristályok abszorpciós színe két V -típusú sávból áll, amelyek maximuma (93°K hőmérsékleten mérve) 323 nm-nél, ill. 222 nm-nél fekszik. Az ESR és optikai mérések alapján a két V -sáv közül a 323 nm-es a Hayes és Nichols [42] által 196°K -on kimutatott paramágneses V_K^M -centrumokhoz rendelhető. A 222 nm-es sáv diamágneses centrum és közel ott fekszik, ahol a tiszta KCl kristály V_2 -sávja jelentkezik. Jelölésére megkülönböztetésül a V_2^M szimbólumot használjuk.

Megállapításaink a következők:

a) Mindkét V -sáv szobahőmérsékleten a dózis növelésével kezdetben monoton nő, a V_K^M -sáv azonban csakhamar telítési értéket vesz fel, aminek következtében egyre dominánsabbá válik a V_2^M -sáv. Ha a színezett kristályt „pihentetjük”, a színtelenedés ellenére a V_2^M -sáv kezdetben nő és csak kb. 1 órás pihentetés után kezd csökkenni akkor, amikor a V_K^M -sáv gyakorlatilag már eltűnt. E tényből arra következtetünk, hogy a V_2^M -centrum a V_K^M -centrumokból képződnek, éspedig a legegyszerűbb esetet tételezve fel, két paramágneses V_K^M -centrumból alakul ki egy diamágneses V_2^M -centrum. Az elképzelést más tények is alátámasztják.

b) Ha a kristályt 195°K hőmérsékleten röntgenezzük, kezdetben csak a V_K^M -sáv jelenik meg és később, ill. melegítésre fejlődik ki a V_2^M -sáv.

c) Jelölje az F , V_K^M és V_2^M -sávok maximumaihoz tartozó abszorpciós állandókat α_F , $\alpha_{V_K^M}$ és $\alpha_{V_2^M}$. Ha a V_K^M és V_2^M -sávok között az előzőekben említett kapcsolat áll fenn (és más F -, ill. V -típusú sáv nincsen a kristályban, akkor érvényesnek kell lennie a következő összefüggésnek:

$$\frac{\alpha_F}{\alpha_{V_2^M} + K\alpha_{V_K^M}} = c, \quad (1)$$

ahol K és c konstansok. A K jellemzi a V_K^M - és V_2^M -sávok közötti átalakulást. Így a nevező helyettesíthető annak a V_2^M -sávnak az abszorpciós állandójával, amely akkor létezne, ha valamennyi V -típusú centrum V_2^M -centrum formájában lenne jelen. A c konstans ennek megfelelően az F - és a V_2^M -sávok közötti arányosságot fejezi ki. A tapasztalat a fenti összefüggés érvényességét igazolja és szobahőmérsékleten mérve $K \approx 2$, $c \approx 3$ értékek adódtak.

d) Ha a röntgenezett kristályt szobahőmérsékleten, vagy 195°K -on fehér fénnel világítjuk meg, a V_2^M -centrumoknak V_K^M -centrumokká való alakulása figyelhető meg.

e) Ha a kristályt 93°K hőmérsékleten világítjuk meg fehér fénnel, a V_2^M -sáv rovására a V_K^M -sáv helyett egy új sáv jelenik meg, amelyet $V_{2,K}^M$ szimbólummal jelölünk. Maximuma kb. 335 nm -nél fekszik. Az új sáv melegítés hatására (230°K -on kb. 5 perc alatt) V_K^M -sávvá alakul át. A V_2^M -centrumoknak V_K^M -centrumokká való átalakulása tehát két lépéses folyamat: megvilágítás hatására előbb $V_{2,K}^M$ -centrumok jönnek létre, és ezekből képződnek termikus aktiváció révén a V_K^M -centrumok.

Fehér fénnel való megvilágítás által kiváltott folyamat eredményeként ionizált F -centrum és egy elektronnal „megterhelt” V_2^M -centrum keletkezik. Az utóbbi a $V_{2,K}^M$ -centrum. Ebből V_K^M -centrum csak akkor képződik, ha a $V_{2,K}^M$ -centrum termikus aktiváció révén kölcsönhatásba lép a visszamaradt anion vakanciával. A $V_{2,K}^M$ -centrumból tehát egy V_K^M -centrum és egy kalcium-vakancia komplex jön létre.

g) A fentiek alapján meghatároztuk a V_K^M - és V_2^M -sávok oszcillátorerősségét az F -sáv oszcillátorerősségével kifejezve. Számításaink szerint

$$f_{V_K^M} \approx 0,3 f_F \quad \text{és} \quad f_{V_2^M} \approx 1,16 f_F. \quad (2)$$

h) A színezés mechanizmusát $\text{KCl}(\text{Ca})$ rendszer esetében a következő módon képzeljük el. A röntgensugárzás V_K^M - és F -centrumokat kelt a Crawford és Nelson [92] által javasolt módon. A V_2^M -centrumok a V_K^M -centrumokból termikus aktiváció révén képződnek; két V_K^M -centrumból keletkezik egy V_2^M -centrum, tehát két kation és egy anion vakanciában elhelyezkedő Cl_3^- molekulaionnak tekinthető. Az ilyen képződmény lokálisan negatív, a neutralitást a környezetben levő két szubsztitúciós Ca^{++} ion biztosítja. Szimmetrikus képződményekre gondolva, a V_2^M -centrum orientációja kétféle lehet: az egyik esetben a molekulaion tengelye $\langle 100 \rangle$, a másikban $\langle 111 \rangle$ irányú. Az egyes helyzetek különböző valószínűséggel fordulhatnak elő és abszorpciójuk is eltérő lehet. Az a körülmény, hogy $\text{KCl}(\text{Ca})$ rendszerben egyetlen V_2^M -sávot figyelhetünk meg, nem mond ellent a vázolt modellnek.

IRODALOM

1. A. Smakula, Z. Phys. 59, 603, 1930.
2. D. L. Dexter, Phys. Rev. 101, 48, 1956.
3. C. C. Klick, D. A. Patterson, R. S. Knox, Phys. Rev. 133, 1717, 1964.
4. F. G. Kleinschrod, Ann. Phys. 27, 97, 1936.
5. R. H. Silsbee, Phys. Rev. 103, 1675, 1956.
6. C. J. Rauch, J. C. V. Heer, Phys. Rev. 105, 914, 1957.
7. F. Lüty, Z. Phys. 160, 1, 1960.
8. C. A. Hutchison, Phys. Rev. 75, 1769, 1949.
9. R. Kaplan, B. J. Bray, Phys. Rev. 129, 1919, 1963.
10. A. F. Kip, C. Kittel, R. A. Levy, A. M. Portis, Phys. Rev. 91, 1066, 1953.
11. G. Fehér, Phys. Rev. 103, 834, 1956.; 105, 1122, 1957.; 114, 1219 és 1245, 1959.
12. H. Seidel, Z. Phys. 165, 218 és 239, 1961.
13. B. S. Gowary, F. J. Adrian, Phys. Rev. 105, 118, 1957. Solid State Phys. 10, 127, 1960.
14. H. Pick, Ann. Phys. 37, 421, 1940.
15. H. Ohkura, K. Awene, S. Miyamoto, J. Phys. Soc. Japan 15, 934, 1960.
16. C. Z. van Doorn, Y. Haven, Phyllops Res. Rept. 11, 479, 1956.
17. H. Gross, Z. Phys. 164, 341, 1961.

18. M. Schwoerer, H. C. Wolf, Z. Phys. 175, 457, 1963.
19. H. Seidel, Phys. Letters 7, 27, 1963.
20. H. Pick, Z. Phys. 159, 69, 1960.
21. D. C. Krupka, R. H. Silsbee, Phys. Rev. Letters 12, 193, 1964.
22. H. Seidel, M. Schwoerer, D. Schmid, Z. Phys. 182, 398, 1965.
23. S. Schnatterly, W. D. Compton, Phys. Rev. 135, A 227, 1964.
24. F. Lüty, Z. Phys. 160, 1, 1960.; F. Okamoto, Phys. Rev. 124, 1090, 1961.; G. Chiarotti, U. M. Grassano, Nuovo Cim. 46, 78, 1966.; G. Jadonisi, B. Proziozi, Nuovo Cim. 48, 91, 1967.
25. R. Casler, P. Pringsheim, P. Yuster, J. Chem. Phys. 18, 887 és 1564, 1950.
26. H. Dorendorf, Z. Phys. 129, 317, 1951.
27. R. Voszka, I. Tarján, L. Berkes, J. Krajsovszky, Kristall und Technik 1, 423, 1966.
28. F. Seitz, Rev. Mod. Phys. 26, 7, 1954.
29. J. H. O. Varley, J. Nuclear Energy 1, 130, 1954.
30. W. Känzig, Phys. Rev. 99, 1890, 1955.
31. T. G. Castner, W. Känzig, J. Phys. Chem. Solids 3, 178, 1957.
32. T. O. Woodruff, W. Känzig, J. Phys. Chem. Solids 5, 268, 1958.
33. C. J. Delbecq, B. Smaller, P. H. Yuster, Phys. Rev. 111, 1235, 1958.
34. C. J. Delbecq, W. Hayes, P. H. Yuster, Phys. Rev. 121, 1043, 1961.
35. R. Gazzinelli, R. Mieher, Phys. Rev. Letters 12, 644, 1964.
36. D. F. Daly, R. L. Mieher, International Symposium in Color Centres in Alkali Halides, University of Illinois, 1965.
37. C. E. Bailey, Phys. Rev. 136, A 1311, 1964.
38. J. E. A. Alderson, phys. stat. sol. 7, 21, 1964.
39. R. B. Murray, F. J. Keller, Phys. Rev. 137, 942, 1965.; Phys. Rev. 153, 993, 1967.
40. L. A. Pung, J. J. Haldre, Izv. Akad. Nauk SzSzSzR, 30, 1446, 1966.
41. Watterich A. diplomamunka, 1966.
42. W. Hayes, G. M. Nichols, Phys. Rev. 117, 993, 1960.
43. R. Voszka, T. Horváth, A. Watterich, phys. stat. sol. 23, K 71, 1967.
44. R. Voszka, T. Horváth, A. Watterich, Acta Phys. Hung. 24, 255, 1968.
45. A. Watterich, M. Gécs, R. Voszka, phys. stat. sol. 31, 571, 1969.
46. W. Hayes, Journal Appl. Phys. Suppl. 44, 329, 1962.
47. W. H. Duering, J. J. Markham, Phys. Rev. 88, 1043, 1952.
48. W. D. Compton, C. C. Klick, Phys. Rev. 110, 349, 1958.
49. C. J. Delbecq, J. L. Kolopus, E. L. Yasaitis, P. H. Yuster, Phys. Rev. 154, 866, 1967.
50. W. Känzig, T. O. Woodruff, J. Phys. Chem. Solids 9, 70, 1958.
51. M. L. Dakss, R. L. Mieher, International Symposium in Color Centers in Alkali Halides, University of Illinois, 1965.
52. W. Känzig, J. Phys. Chem. Solids, 17, 80, 1960.
53. M. H. Cohen, W. Känzig, T. O. Woodruff, J. Phys. Chem. Solids 11, 120, 1959.
54. P. Yuster, Bull. Am. Phys. Soc. 8, 541, 1963.
55. J. Lambe, E. J. West, Phys. Rev. 108, 634, 1957.
56. N. Itoh, J. Phys. Chem. Solids 27, 197, 1966.
57. C. C. Klick, D. A. Patterson, Phys. Rev. 130, 2169, 1963.
58. T. M. Srinivasan, W. D. Compton, Phys. Rev. 137, A 264, 1965.
59. N. Itoh, B. S. H. Royce, J. Phys. Chem. Solids 27, 1366, 1966.
60. G. J. Dienes, R. Smoluchowski, J. Phys. Chem. Solids 27, 611, 1966.
61. A. Behr, H. Peisl, W. Waidelich, Phys. Letters 24, 379, 1967.
62. J. Faraday, W. D. Compton, Phys. Rev. 138, 839, 1965.
63. N. Itoh, T. Kowamata, T. Hirao, H. Kanzaki, Phys. Soc. Japan 23, 453, 1967.
64. W. Gebhart, Phys. Chem. Solids 23, 1123, 1962.
65. K. Tharmalingam, Phys. Chem. Solids 25, 255, 1964.
66. N. Itoh, B. S. H. Royce, S. Schmoluchowski, Phys. Rev. 137, A 1010, 1965.; 138, A 1766, 1965.
67. J. D. Kingsley, J. Phys. Chem. Solids 23, 949, 1962.
68. T. Ishii, J. Phys. Soc. Japan 21, 2202, 1966.
69. J. C. Garth, E. Sonder, J. Phys. Chem. Solids 29, 1737, 1968.
70. P. G. Harrison, Phys. Rev. 131, 2505, 1963.
71. J. S. Nadeau, J. Appl. Phys. 33, 3480, 1962.
72. R. L. Fleischer, Acta. Metall. 10, 835, 1962.
73. W. A. Siebley, E. Sonder, J. Appl. Phys. 34, 2366, 1963.

74. J. S. Nadeau, J. Appl. Phys. 34, 2248, 1964 és 35, 1248, 1964.
75. T. P. P. Hall, D. Pooley, P. T. Wedephol, Proc. Phys. Soc. 83, 635, 1964.
76. C. B. Lusik, G. G. Lidia, M. A. Elango, Fiz. Tverd. Tela 6, 2256, 1964.
77. W. A. Siebley, J. R. Russel, J. Appl. Phys. 36, 810, 1965.
78. E. Sonder, W. A. Sibley, Phys. Rev. 140, A 534, 1965.
79. E. Sonder, W. A. Sibley, J. E. Rowe, C. M. Nelson, Phys. Rev. 153, 1000, 1967.
80. A. Bleckmann, K. Thomen, Z. Phys. 191, 160, 1966.
81. G. J. Crawford, W. Fuchs, D. A. Wiegand, Phys. Rev. Letters 16, 1154, 1966.
82. R. Balzer, H. Peisl, W. Waidelich, Z. Phys. 204, 405, 1967.
83. E. H. Farnum, B. S. Royce, Phys. Letters 26, 164, 1968.
84. F. Lüty, Phys. Chem. Sol. 23, 677, 1962.
85. R. W. Christy, D. M. Phelps, Phys. Rev. 124, 1053, 1961; T. P. Zaleskiewitz, R. W. Christy, Phys. Rev. 135, A 194, 1965.
86. R. W. Christy, E. Fukusima, Phys. Rev. 118, 1222, 1960.
87. H. N. Hersh, Phys. Rev. 105, 1410, 1957.
88. G. Giuliani, A. Perinati, E. Reguzzoni, G. Chiarotti, Solid State Comm. 3, 161, 1965.
89. E. Sonder, N. A. Sibley, Phys. Rev. 140, A 539, 1965.
90. G. Giuliani, E. Reguzzoni, phys. stat. sol. 25, 437, 1968.
91. T. Ishii, J. Rolfe, Phys. Rev. 141, 758, 1966.
92. J. H. Crawford, Jr. C. M. Nelson, Phys. Rev. Letters 5, 314, 1960.
93. N. Itoh, M. Ikeya, J. Phys. Soc. Japan 22, 1170, 1967.
94. J. Z. Damm, F. C. Tompkins, Disc. Far. Soc. 31, 184, 1961.
95. B. M. Liszicin, Optika i Spektroszkopija 22, 86, 1967.
96. F. Seitz, Rev. Mod. Phys. 18, 384, 1946.
97. H. Rabin, C. C. Klick, Phys. Rev. 117, 1005, 1960.
98. A. Behr, W. Waidelich, Phys. Letters 23, 620, 1966.
99. W. A. Sibley, J. R. Russel, Phys. Rev. 154, 831, 1967.
100. G. Turchányi, M. Mátrai, I. Tarján, Rev. Roum. Phys. 13, 59, 1968.
101. J. H. O. Varley, Nature 174, 886, 1954; J. Nucl. Energy I, 30, 1954.; J. Phys. Chem. Solids 23, 985, 1962.
102. C. C. Klick, Phys. Rev. 120, 760, 1960.
103. R. E. Howard, S. Vosko, R. Smoluchowski, Phys. Rev. 122, 1406, 1961.
104. F. E. Williams, Phys. Rev. 126, 70, 1962.
105. D. Pooley, Solid. State Comm. 3, 241, 1965.; Proc. Phys. Soc. 87, 245, 1966.; 257, 1966.
106. H. N. Hersh, Phys. Rev. 148, 928, 1966.; J. D. Konitzer, H. N. Hersh, J. Phys. Chem. Solids 27, 771, 1966.
107. F. Lüty, Halbleiter Probleme Vieweg Braunschweig 6, 238, 1961.
108. V. H. Ritz, Phys. Rev. 133, A 1452, 1964.; Phys. Rev. 142, 505, 1966.
109. I. P. P. Hall, D. Pooley, W. A. Runciman, P. T. Wedephol, Proc. Phys. Soc. 84, 719, 1964.
110. M. Ikezawa, S. Wakita, T. Kojima, J. Phys. Soc. Japan 23, 138, 1967.
111. I. McC. Torrens, L. T. Chadderton, Phys. Rev. 159, 671, 1967.
112. J. H. Schulmann, J. W. Boag, phys. stat. sol. 3, 516, 1963.
113. R. B. Gordon, A. S. Nowick, Phys. Rev. 101, 977, 1956.
114. P. W. Mitchell, D. A. Wiegand, R. Smoluchowski, Phys. Rev. 121, 484, 1963.
115. F. Fröhlich, S. Altrichter, Ann. Phys. 17, 143, 1966.;
F. Fröhlich, G. Hensel, phys. stat. sol. 24, 535, 1967.
116. H. Rabin, Phys. Rev. 116, 1381, 1959.
117. H. Kelting, H. Witt, Z. Phys. 126, 697, 1949.
118. A. B. Lidiard, Handbuch der Phys. (Springer, Berlin, 1961.)
119. G. D. Watkins, Phys. Rev. 113, 79, 1959.
120. R. W. Dreyfus, A. S. Nowick, Phys. Rev. 126, 1367, 1962.
121. F. K. Fong, E. Y. Wong, Phys. Rev. 162, 348, 1967.
122. J. S. Cook, J. S. Dryden, Proc. Phys. Soc. (London) 80, 479, 1962.; J. S. Dryden, J. Phys. Soc. Japan, 18, Supplement III. 129, 1963.
123. M. Ikeya, K. Kusao, T. Okada, N. Itoh, T. Suita, J. Phys. Soc. Japan 20, 289, 1965.; M. Ikeya, N. Itoh, T. Okada, T. Suita, J. Phys. Soc. Japan 21, 1304, 1966.
124. I. Tarján, R. Voszka, A. Siegler, L. Berkes, Journal de Physique, Colloque C 4 Supplement 28, 137, 1967.
125. M. Beltrami, R. Cappelletti, R. Fieschi, Phys. Letters 3, 10, 1964.

- 126. *C. Bucci, R. Fieschi, G. Guidi*, Phys. Rev. 148, 816, 1966.
- 127. *F. Rosenberger*, II. Phys. Inst. der Techn. Hochschule Stuttgart, Diplomarbeit, 1964.
- 128. *H. Gründig*, Z. Phys. 182, 477, 1965.
- 129. *M. Lébl, J. Trnka*, Z. Phys. 186, 128, 1965.

ÖSSZEFOGLALÓ MUNKÁK

- 1. *N. F. Mott, R. W. Gurney*, Electronic Processes in Ionic Crystals, Clarendon Press, Oxford, 1946.
- 2. *S. I. Pekar*, Untersuchungen über die elektronentheorie der Kristalle, Akademie Verlag, Berlin, 1954.
- 3. *D. L. Dexter*, Theory of the Optical Properties of Interfections in Nonmetals, Solid State Physics 6, 1958, 353 old.
- 4. *B. S. Gourary, F. J. Adrian*, Wave Function for Electron-Excess Color Centers in Alkali Halide Crystals, Solid State Phys. 10, 1960, 127 old.
- 5. *J. H. Schulman, W. D. Compton*, Color Centres in Solids, Pergamon Press, 1963.
- 6. *H. Siedel, H. C. Wolf*, phys. stat. sol. 11, 3, 1965.
- 7. *H. Pick*, Struktur von Störstellen in Alkalihalogenid Kristallen, Ergebnisse der exakten Naturwiss. Springer 38, 1965.
- 8. *C. P. Slichter*, Principles of Magnetic Resonance, New York, 1963.
- 9. *J. J. Markham*, F-Centers in Alkali Halides, Academic Press, 1966.

MAGYAR
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
KÖNYVTÁRA

Technikai szerkesztő: Turchányi György
A kiadásért felel az Akadémiai Kiadó igazgatója — Műszaki szerkesztő: Helle Mária
A kézirat beérkezett: 1971. IX. 22. — Terjedelem: 9,1 (A/5) ív
71-4816 — Szegedi Nyomda

A MAGYAR
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
MATEMATIKAI ÉS FIZIKAI TUDOMÁNYOK
OSZTÁLYÁNAK
KÖZLEMÉNYEI

Matematikai, fizikai, csillagászati dolgozatokat, referátumokat, könyvismertetéseket, a Tudományos Minősítő Bizottságnak a III. Osztályra vonatkozó híreit s a III. Osztály híreit közli. Évenként egy kötet (kb. 40 ív) jelenik meg (négy szám alkot egy kötetet).

A közlemények előfizetési ára kötetenként, azaz évenként 60 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, Budapest V., Alkotmány u. 21. Pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11488, külföldi megrendelések a „Kultúra” Könyv- és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat, Budapest I., Fő utca 32.

(Pénzforgalmi jelzőszám: 218-10990 útján eszközölhetők.)

Ára: 10,— Ft.

Előfizetés kötetenként 48,— Ft.

INDEX: 26 491

TARTALOMJEGYZÉK

	oldal
<i>Tompa Kálmán</i> : Szennyezés körüli töltéssűrűség oszcilláció aszimptotikus viselkedése réz alapú híg ötvözetekben	1
<i>Györgyiné Horváth Tünde</i> : V-típusú centrumok vizsgálata KCl(Ca) rendszerben	61

⁰
**MAGYAR
FIZIKAI FOLYÓIRAT**

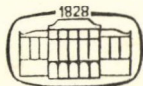
**A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI**

**KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR,
PÁL LÉNÁRD ÉS SZALAY SÁNDOR
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL**

**SZERKESZTI
JÁNOSSY LAJOS**

XX. KÖTET

2. FÜZET



**AKADÉMIAI KIADÓ
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
BUDAPEST 1972**

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: BUDAPEST V., ALKOTMÁNY UTCA 21. SZ.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A klaszszikus irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikkeket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10–10 dolgozat megjelenése után a folyóiratfüzetekről leválasztva, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóirattól évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 ív terjedelemben.

A kéziratok a következő címre küldendők:

Jánossy Lajos akadémikus
Budapest, XII., Konkoly Thege út
Központi Fizikai Kutató Intézet

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként 48 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, Budapest, V., Alkotmány utca 21. pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11 248. külföldi megrendelések a „Kultúra” Könyv- és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat, Budapest, I., Fő utca 32. (Pénzforgalmi jelzőszám: 218-10990) útján eszközölhetők.

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmi ismertetőt írjanak.
2. A levezetéseknek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közöljék. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázószöveget írjanak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.

A BESZÉDKÓRUS MÓDSZER*

TARNÓCZY TAMÁS

MTA Akusztikai Kutatócsoport, Budapest

A beszéd hosszú idejű átlagos energia-színképének meghatározására korábban egy új módszert dolgoztunk ki. A módszer szerint több személy egyszerre különböző szöveget mond, és az így keletkezett beszédzörejt egyetlen mágnesszalagra vesszük föl. A fölvételt a folytonos színképű, időben állandó zörejekre érvényes módszerek szerint elemezhetjük. Jelen dolgozatban bizonyítjuk, hogy már nyolc személy beszédkórusa folytonos és állandó színképű beszédzörejt eredményez, amelynek akár 10 s-os darabja is jellemző színképet ad. Ezáltal mind a hosszú idejű átlagos, mind az egyéni ejtés mód szerinti átlagolás egyszerre megoldott. Tekintve, hogy maga a beszéd nem tekinthető sztochasztikus folyamatnak, a beszédkórus módszer, amely a folyamatot sztochasztikussá teszi, egyben a központi határértéktétel érvényességének kiszélesítésére is példát ad.

1. Bevezetés

A beszédakusztikai kutatás súlypontját ma világszerte a beszédhangok vizsgálatára helyezik. Azonban éppen e vizsgálatok során derült ki, hogy több alapvető feladat megoldásához a beszéd egészének tulajdonságait is ismernünk kell. Ilyen feladat pl. a beszédátviteli láncok optimális méretezése, a nyelvek hanganyagának statisztikai összehasonlítása, a helyes dinamikasabályozás megoldása stb.

Így jutottak a kutatók már az 1920-as években [1, 2] arra a gondolatra, hogy a beszéd egészének színképét valamilyen módszerrel meghatározzák. Az első jól használható adatokat tartalmazó kísérleti eredmények *H. K. Dunn* és *S. D. White* [3] amerikai szerzőktől származnak 1940-ből. Az általuk alkalmazott módszerrel előttük is és utánuk is számos szerző dolgozott. A II. Világháború alatt a beszéd-színkép ismerete a jó mikrofonbeszédű személyek kiválasztásában, a nagy magasságok érthetőségre gyakorolt hatásának tanulmányozásában és a különféle gázmaszkok torzító hatásának megismerésében fontos adattá vált. Az idevonatkozó vizsgálatokat a feloldás után 1947-ben mind a Bell Laboratórium [4], mind a Harvard Egyetem [5] közzétette. A vizsgálatok alapelve változatlanul megmaradt: hosszú idejű beszéd 1/8 s-os időintervallumokban integrált szűrt jelét mérték, és a mért adatokat statisztikai módszerekkel dolgozták föl. *S. S. Stevens* és munkacsoportja [3] a lakklemez szögzítést és a többszöri átjátszást is bevezette.

Ugyanezekkel a módszerekkel dolgozott 1953-ban *J. M. Polkovszkij* [6], valamint *Ju. Sz. Bükov* [7] is, amikor orosz nyelvre határozta meg az átlagos energia-színképet. *E. Skudrzyk* és *E. Steinkogler* 1954-ben végzett mérései [8] — korábbi idézeteimmel ellentétben — valószínűleg csak angol nyelvre vonatkoznak. *Steinkogler*

* Érkezett 1968. szeptember.

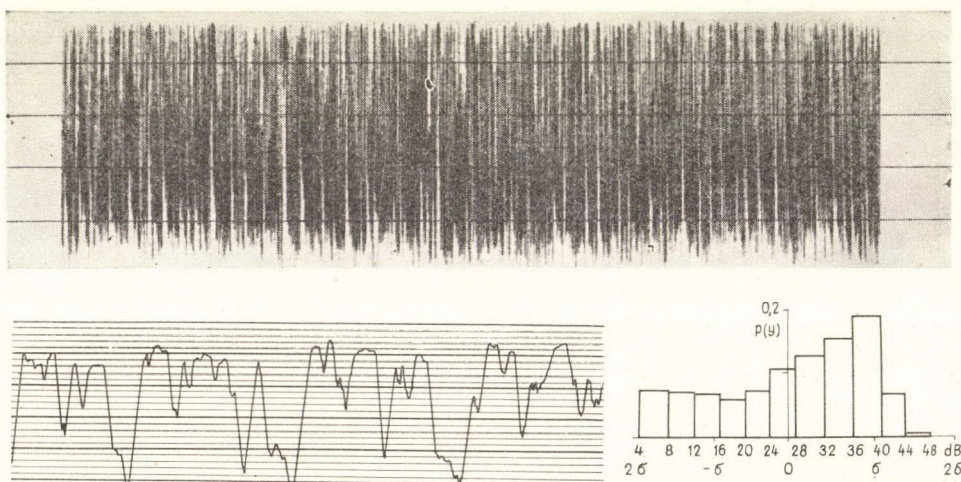
disszertációja nyomtatásban nem jelent meg, *Skudrzyk* rövid utalása pedig nem egészen világos. Egyébként ez a vizsgálat folyt a leghosszabb idejű (20 perces) szöveggel. *G. Fant* 1959-ben szintén a Dunn és White-féle módszerrel végzett a svéd nyelvre [9] és *W. Jassem* ugyanebben az évben a lengyel nyelvre [10] színekép-méréseket.

Jelen munka szerzője 1954-ben új lehetőséget ismert föl és röviddel később, megfelelő módszert dolgozott ki [11] a beszédszínekép meghatározására. Jelen dolgozat célja, hogy részletesebb megfontolásokat közöljön erről a beszédszínekép meghatározási elvről és módszerről.

2. A probléma fölvázolása

A beszéd, mint akusztikai jelenség, ún. kvázisztochasztikus folyamat. Ez az állapot azzal a következménnyel jár, hogy bár az akusztikai jel pillanatnyi értékei nem nőnek végtelenbe és nem is tartanak végtelen ideig, a jel abszolút értéke végtelen intervallumon általában mégsem integrálható. Amellett nem is ismerjük a jelfüggvényt minden időben. Következésképpen a színeképfüggvények előállítása nehézségekbe ütközik.

2.1. A beszéd nem tekinthető szigorúan sztochasztikus folyamatnak, mert nem tartalmazza az ilyen folyamatokat jellemző teljes rendezetlenséget, s így nem is alkalmazhatók rá minden további nélkül a teljesen rendezetlen folyamatokra igazolt tételek. A teljesen rendezetlen folyamatoktól való eltérést világosan szemléltetik a többiek által is meghatározott amplitúdó-sűrűség eloszlási görbék [12]. Ezek az eloszlási görbék szabálytalanok, azaz nem követik a statisztikus ingadozású zörejek közelítőleg Gauss-eloszlási képét, hanem ahhoz képest szétterülnek. Amellett nem szimmetrikusak, személyenként és az akusztikai környezet függvényében változnak, végül a 0-körüli értékeloszlás rendkívül érzékeny a beszéd sebességére (szóközi szünetek).



1. ábra. Egyetlen személy beszédének 500 s időtartamú szintdiagramja (fölső kép), valamint ennek egy 6 s időtartamú részlete (balra alul) és a teljes időre statisztikázott sűrűség eloszlás (jobbra alul)

A beszéd amplitúdó-sűrűség eloszlása helyett a nagy átfogás miatt szokásosabb a függvény időburkolója logaritmusának eloszlási képét vizsgálni. Néhány tájékoztató mérést magunk is végeztünk. Az 1. ábrát annak bemutatására közöljük, hogy az eloszlás mennyire nem tekinthető normálisnak. Az ábra magyar nyelvű szöveg néhány szavas szintdiagramját és 500 s időintervallumban készített eloszlási statisztikáját tárja elénk. A 100 ms-onként vett pillanatnyi mintaértékek csaknem a teljes értéktartományt (50 dB) közel egyenletesen szórják be. A négyzetes eltérés igen magas szintértéke (12,2 dB) arra vall, hogy a középérték csak nagy hibával határozható meg. Az eloszlási statisztikát a Brüel és Kjaer-féle 2305 típusszámú szintíróval és a 4420 típusszámú eloszlási elemzővel készítettük. A kísérleti és számolási eljárásra vonatkozólag az irodalomra utalunk [13].

Jól igazolható a beszédnek a szigorúan sztochasztikus folyamatoktól eltérő viselkedése a beszéd önkorrelációs függvényével is. A legtöbb nyelv elég sok magánhangzót vagy más periódusos jellegű hangot tartalmaz, és ezek a hangok néhány perióduson belül alaki hasonlóságot árulnak el. Ezért a folyamatos beszéd teljes jelsorának a periódussal azonos idejű eltolásával a jelek egy része ismét összeesik. Ez a jelenség azonban több okból is elmosódott. Először azért, mert az alaphang frekvenciája beszéd közben ingadozik. Másodszor azért, mert a „periódusos” típusú jelek sem igazán periódusosak (formánsvándorlás). Végül pedig azért, mert a periódusos típusú beszédhangok állandósult állapotának időtartama nem elég hosszú: kb. 50...100 ms, azaz férfiaknál (alaphang 100...150 Hz) 5...15, nőknél (alaphang egy oktávval magasabb) 10...30 periódus.

Az átlagos periódusidő figyelembevételével férfi beszéd önkorrelációs függvényében $\tau=7\ldots10$ ms eltolás táján, nőiben $\tau=3,5\ldots5$ ms táján — és ezek többszörösei helyén — enyhe mellékmaximumok várhatók. Amerikai beszéd önkorrelációs függvényképein [12, 14] ezeket a helyeket meg is lehet találni.

2.2. Az eddigiekben azt igyekeztünk igazolni, hogy a beszéd folyamat nem szigorúan sztochasztikus jellegű. Ebből azonban egyáltalán nem következik, hogy a beszéd akusztikai formája determinált folyamatnak volna tekinthető. A t_0 ideig lefolyt jelenség teljes ismeretében nem tehetünk valószínű jóslást a $t_0 + \Delta t$ időpillanat állapotára.

Ennek is több oka van. Egyes beszédhangok ugyan periódusos jellegűek, de mások a rendszertelen ingadozású zörejfolyamatok jellegét viselik magukon. Ezeknek az alapjellegeknek közbeeső állapotai is és keverékei is előfordulnak beszédhangok gyanánt. Tovább bonyolítja a problémát, hogy mivel beszéd közben a hangképző szervek állandó mozgásban vannak, az akusztikai jelsor is gyakrabban árul el tranziens jelleget, mint rövid idejű állandósult állapotot.

Az előrejelzésnek két lehetősége van: egy rövid idejű és egy hosszú idejű. Az előbbi egyetlen hangon belül az amplitúdó értékeire vonatkozik és így idő határa $\Delta t=5\ldots100$ ms. Ezen az időn belül a periódusos típusú hangzókra vonatkozó jóslás $t_0 + T$ helyekre (T a periódusidő) elég nagy valószínűségű. A hosszú idejű jóslást úgy határozhatjuk meg, hogy a rövid időközökben átlagolt jelek valamilyen sajátosságát $\Delta t > 200$ ms idő múlva kell előre jelezni. Durva közelítéssel ez a következő hang vagy szótag minimális időtávolsága.

Ha a pillanatról pillanatra változó alaphangmagasság, intenzitás és színekép ellenére elérhetnők is a jelsor kvantálását, vagyis a beszédhangok gépi elemzésén alapuló szétválasztását, a t_0 időpont után következő hang meghatározását csak változó szerencsével tudnók megkísérteni. Egy már azonosított szövegrész nem

követel meg okvetlenül és teljes bizonyossággal egy következő hangot. Ebben a tekintetben találhatunk nagyon jó és nagyon rossz időpillanatokat. Egy háromnegyed részében elhangzott szó következő hangja csaknem teljes bizonyossággal megadható, egy lezárt mondat, vagy gondolat után következő hang teljesen bizonytalan. Az előrejelzés bizonytalansága Δt idő növelésével természetesen fokozódik.

2.3. Mindezekből következik, hogy akár a szigorúan periódusos, akár a szigorúan sztochasztikus folyamatok jól megalapozott matematikai és fizikai elemzési módszerei egyáltalán nem, vagy csak nagyon óvatosan alkalmazhatók a beszéd-folyamat akusztikai vizsgálatára.

Ezt a következtetést azért kívánjuk hangsúlyozni, mert az irodalomban — jobb lehetőség híján — korábban mindig a teljes rendezetlenség feltételezésével fogtak hozzá a beszédszínek meghatározásához. Ez pedig még akkor is hibás eredményekhez vezet, ha a statisztikázás időtartamát meghosszabbítják. Általában 10...20 perces mérések szokásosak, mert feltételezés szerint ilyen hosszú szövegben (2000...4000 szótag) már a statisztikus eloszlásuknak megfelelően szerepelnek a nyelvben előforduló beszédhangok.

Ez igaz is; azonban a túl rövid hangok, valamint a hangközi és szóközi szünetek mégis bajt okozhatnak. Az impulzus jellegű hangok nagyon rövid elemzési időt kívánnak meg, különben a hangok jellege helyett a szűrőket mérjük. A hangközi és szóközi szünetek alatt pedig leghelyesebb volna az egész elemzési műveletet kikapcsolni, mert ez alatt az idő alatt az integrátorok az alapzaj szinképi adatait gyűjtik. Mivel a szünetek a beszéd sebességétől függően a teljes beszédidő 10...30%-át tehetik ki, az elkövetett hiba — különösen a szélső frekvenciasávokban — számottevő. Az említett nehézségek gépi úton ugyan áthidalhatók, de csak igen bonyolult apparátussal: késleltető vonalakkal és számológépekkel. Ilyen fajta berendezések eddig még nem készültek.

A teljes igazság kedvéért meg kell jegyeznünk, hogy a sztochasztikus jelleg a vizsgálati időtartam növelésével természetesen fokozódik, míg a determinisztikus jelleg, amely kis időintervallumokban megjelenhet, hosszabb idő átlagában elenyészik. Ezért nevezzük a hosszú idejű beszéd akusztikai jelsort kvázisztochasztikus folyamatnak. Az eredmények helyessége azonban nagymértékben attól függ, hogy a vizsgálati módszert mennyire tudjuk az adott folyamathoz adaptálni.

2.4. A beszéd-folyamat jellemzésére többféle lehetőség kínálkozik: vizsgálatokat végezhetünk az időfüggvényen és vizsgálhatjuk a folyamat szinképi összetételét. Mindezekben az elméleti és kísérleti vizsgálatokban figyelembe szokás venni a hallás valószínű értékelő eljárás módját, hogy a gépi úton nyert adatok összhangban legyenek az agyban földolgozásra kerülő adatokkal.

Első gondolat magának az oscillogramnak, az $y=f(t)$ függvénynek a felhasználása. Bár ez a függvény a teljes akusztikai információt hordozza és kísérletileg is könnyen meghatározható, a probléma megoldásához mégsem elegendő. Az oscillogram a beszéd tulajdonságait időben felbontva szállítja, és csak a különleges elemző és értékelő sajátosságokkal rendelkező emberi agy képes a jelsort kvantálni, a titkosítást megfejteni, valamint a beszéd egészére vonatkozó átlagolásokat és következtetéseket elvégezni. Ehhez azonban az agy az $f(t)$ függvényt tovább alakítja.

Nagyon valószínű, hogy az $f(t)$ függvény agybeli földolgozása során a jelstatisztika is fontos szerephez jut. Az amplitúdó-sűrűség eloszlása, de különösen valamely időintervallumban az y_0 érték fölött előforduló csúcsok, ill. az y_0 -hoz tartozó null-átmenetek száma fontos információkat hordoz. A beszédhangok ab-

szolút aktivitásának fölismerésében (érthetőség) pl. döntő jelentőségű a null-átmenetek időbeli alakulása.

A $p(y)$ eloszlási függvény csak szigorúan sztochasztikus folyamatokra normális eloszlású; más folyamatokra általában csak kísérletileg határozható meg. Ugyancsak meghatározható kísérletileg a null-átmenetek száma is, de sem egyik sem a másik adattal nyert információkat ma még nem tudjuk beépíteni a gépi beszédfölismerés mechanizmusába.

Itt jegyezzük meg, hogy valamely folyamat szigorúan sztochasztikus voltának igazolása (pl. a Gauss-féle eloszlással) még nem mond semmit a folyamat frekvencia szerinti összetételéről. A szinkép tehát több információt tartalmaz, mint az eloszlási függvények.

A beszédfolyamat pillanatnyi szinképi formáját az agy szintén előállítja. Ugyanis a jelsor kvantálásához és az egyes hangok fölismeréséhez minimálisan minden időpillanatban végzett rövididejű szinképelemzés szükséges. Ez a tevékenység valószínűleg még az agy alatti idegtalálkozási szinten megtörténik, amit az idegen nyelvű beszéd hallás utáni közvetlen utánzásának képessége sejtett.

Maga a rövididejű elemzés nem könnyű feladat. A Fourier-transzformáció létezésének feltétele folyamatos beszédre nem teljesül. Azonfölül a pillanatnyi függvénytípus sem érvényes minden időben, hiszen előtte és utána másfajta időfüggvény következik. Ezért az agynak egy olyan „múlra néző” $h(t)$ segédfüggvényt kell alkalmaznia, amelynek $f(t)$ -vel való szorzata Fourier-transzformálható, és amely az időben elég gyorsan csökken, hogy az integrálás eredménye valóban rövid idejű állapotot tükrözzön. A kérdéses összefüggés

$$F(\omega, t) = \int_{-\infty}^{\infty} f(\lambda)h(t-\lambda)e^{-j\omega\lambda} d\lambda \quad (1)$$

formában adható meg. Az amplitúdó-szinkép (1 Hz-re eső amplitúdó-sűrűség függvény) az előbbi megfontolás értelmében nem egyszerűen az $f(t)$ pillanatonkénti Fourier-transzformáltja, hanem az $f(t)e^{-j\omega t}$ függvénynek egy a hallás időállandójától függő $h(t)$ idő-ablak függvénnyel (súlyozó függvénnyel) való konvolúciója. Korrekt kísérleti meghatározása csak nem túl rövid idejű állandósult állapotokban lehetséges.

A hallás időállandója többértelmű kifejezés. Ezért pontosítani kell, melyik időállandóról beszélünk. Az újabb irodalomban a hangosság $(1 - 1/e)$ hányadára való fölnövekedésének idejét 30...50 ms körül mérik. Ez tekinthető a rövididejű elemzés agybeli idő-ablak függvénye „lecsengési idejének”. A $h(t)$ ablak függvény időértéke azonban magától a jelalaktól is függ. Ez abból következtethető, hogy időfölbontásban a p , t , k jellegű hangok gyors egymásutánját (1...5 ms) is aperciáljuk, frekvenciafölbontásban pedig az u , o , a -félék közeli formánsait (néha 10...50 Hz különbség, azaz 40...200 ms elemzési idő) is megkülönböztetjük.

Az agybeli értékelés módjára vonatkozó föltevések közül az egyik igen valószínű, hogy az agy a hallott jelsort a Fourier-transzformáció mellett önkorrelációs eljárással is elemzi, vagyis a

$$\varphi(\tau) \equiv \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2T} \int_{-T}^T f(t)f(t+\tau) dt \quad (2)$$

függvényt is képezi. Erre utal pl. a kis szintű beszédjeleknek a környezeti zajból kihallható és megérthető volta (cocktail-party effect).

A $\varphi(\tau)$ kísérletileg is képezhető, de mivel $f(t)$ összetétele pillanatról pillanatra változik, vagy az integrálást kell véges időre korlátoznunk, vagy az (1) összefüggéshez hasonlóan egy mélyáteresztő szűrőnek megfelelő súlyfüggvényt bevezetnünk. Ekkor a pillanatonként változó, ún. „gördülő”

$$\varphi(\tau, t) \equiv \int_{-\infty}^t f(\vartheta) f(\vartheta + \tau) h(t - \vartheta) d\vartheta \quad (3)$$

önkorrelációs függvényt kapjuk, amely a valósághoz hívebben követi az agy valószínű munkáját.

A gördülő önkorrelációs függvény technikailag elsősorban arra használható, hogy a jelsor pillanatnyi sztochasztikus, determinált, vagy kevert jellegéről felvilágosítást szolgáltatasson.

A másik fajta színekép, amit az agy szintén bevon értékelő munkájába, a hosszú idejű energia-színekép. Az átlagos energia-színeképet (1 Hz-re eső teljesítmény) a következő alakban definiáljuk:

$$\Phi(\omega) = \overline{|F(\omega)|^2} \equiv \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2T} \left| \int_{-T}^T f(t) e^{-j\omega t} dt \right|^2 \quad (4)$$

Ennek a színeképfajtának az agybeli képzését és ismeretét biztosan igazolja, hogy a hallgató a hangszínből megítéli a beszéd érzelmi és akarat tartalmát (erősség, hanglejtés, hangsúly) és fölismeri a beszélő személyét (egyéni hangszín).

Az előbbi megjegyzésből következik, hogy agyunkban ezúttal sem kizárólag hosszú idejű átlagolásról van szó, hanem az energia-színekép minden időben való ismeretéről. Matematikailag az (1) és (3) szerinti módszer itt is célravezető, vagyis képezhető a

$$\Phi(\omega, t) = |F(\omega, t)|^2 \equiv \left| \int_{-\infty}^t f(\vartheta) h(t - \vartheta) e^{-j\omega \vartheta} d\vartheta \right|^2 \quad (5)$$

gördülő energia-színekép, amelynek kísérleti meghatározása pontosan ugyanazokat a nehézségeket rejti magában, mint az (1) szerinti rövid idejű amplitúdó-színeképé.

Szigorúan sztochasztikus jelsor esetén — továbbá bizonyos föltételek mellett [15] — érvényes a Wiener—Khintchine reláció, amelynek értelmében a hosszú idejű energia-színekép (4) szerinti alakja az önkorrelációs függvény (2) szerinti alakjának Fourier-transzformáltja. A kapcsolatot a

$$\Phi(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(\tau) e^{-j\omega \tau} d\tau \equiv \mathcal{F}[\varphi(\tau)] \quad (6)$$

összefüggés fejezi ki. Nagyon fontos megjegyzés, hogy hasonló összefüggés a (3) és (5) szerint definiált értékek között nem áll fenn. Ez megnehezíti, bár nem teszi lehetetlenné a hosszú időre átlagolt energia-színeképnek korrelációs módszerrel való meghatározását. Az elméleti és kísérleti nehézségeket az újabb irodalomban már földerítették [16].

A fentebb felsorolt beszédjellemzők minden valószínűség szerint részt vesznek a hallás értékelő-megfejtő folyamatában, de lehet, hogy további jellemzők is helyet

kapnak benne. A fizikai beszéd kutatás gyakorlata ezzel szemben eddig jóformán csak az $F(\omega, t)$ rövid idejű amplitúdó-színképet tudta eredményesen fölhasználni. Újabban mind több figyelmet szentelnek a különféle korrelációs függvények gépi képzésének és a $\Phi(\omega)$ hosszú idejű energia-színkép meghatározásának is. Jelen dolgozatban a szerző által kifejlesztett újfajta meghatározási módszer kapcsán az utóbbival kívánunk foglalkozni.

2.5. A hosszú idejű átlagos energia-színkép meghatározása több alapvető és gyakorlatban is értékesíthető ismeret megszerzése szempontjából döntő jelentőségű. Ezek közül néhány:

Megtudhatjuk, hogy a gégehang felhangsorának és a szájnyílás sugárzási ellenállásának együttes hatása milyen színképi eloszlást eredményez a magas hangok irányában, ill. hogy milyen frekvenciától kezdve érvényesül ez a két tényező a hangot formáló üregek rezonanciás hatásával szemben. Ennek az adatnak az ismerete a hangképzés mechanizmusának jobb megértése szempontjából fontos.

Megvizsgálhatjuk a nyelvek, valamint a csoportos és egyéni ejtésbeli különbségek okozta hatásokat a színkép alakjára. Ezzel adatokat szolgáltatathatunk a nyelvek közötti hasonlóság kérdéséhez, a nemzetközi beszédátviteli láncok optimális használati nyelvének megállapításához, sőt a beszéddel vezérelt gépek kialakításának problémájához is.

Fontos adatokat nyerhetünk a beszédátviteli láncok frekvencia és dinamika szerinti méretezéséhez. Megismerjük a túlterhelés, az áthallás és a megengedhető alapzaj pontos és gazdaságos frekvenciafeltételeit. Mindez a többszatos átviteli rendszerek műszakilag jobb minőségű tervezését teszi lehetővé.

A színképek hangerősségtől függő alakulásának vizsgálata lehetőséget nyújt a hangerősség okozta hangszínváltozás jellegének tanulmányozásához. A nyert adatok egyben igen hasznosak az önműködő hangerőszabályozás eddig közismerten helytelen megoldásmódjának megjavítása szempontjából.

3. Az energia-színkép meghatározása

3.1. Az „energia-színkép” tulajdonképpen a pontosabb „intenzitássűrűség-színkép” kifejezés egyszerűsített formája. Azt a szintértékben kifejezett frekvenciafüggvényt értjük alatta, amely az időben átlagolt hangintenzitás 1 Hz sávszélességre eső értékeit írja le.

Mivel a dimenziók a szint definíciója értelmében kiesnek, mindegy, hogy a szintben ábrázolt színkép jellemzőjéül az intenzitás, teljesítmény vagy energia fogalmak közül melyiket használjuk. Az ábrázolás mértéke az 1 Hz-re vonatkoztatás megjelölésére a „színképvonal-szint”, szemben a „sáv-szint” és a „teljes-szint” megjelölésekkel. Az ábrázolás mértékegységeként a dB/Hz — dimenzionálisan helytelen — „emlékeztető” egységet használjuk.

A 3.1. alatti definíciónk a Plancherel-tétel [17] alkalmazásával lényegében megegyezik a 4 alatti meghatározással. A tétel szerint ugyanis valamely véges időintervallumban létező (máshol zérus) $f(t)$ jelfüggvény időben átlagolt teljesítményére

$$\bar{P} = \frac{1}{T} \int_{-\infty}^{\infty} |f(t)|^2 dt = \frac{1}{T} \int_{-\infty}^{\infty} |F(\omega)|^2 d\omega \quad (7)$$

összefüggés érvényes, ahol $f(t)$ és $F(\omega)$ egymás Fourier-transzformáltja. Az $|F(\omega)|^2/T$ értéket átlagos teljesítménysűrűségnek nevezzük. Föltételezve, hogy a vizsgált jelenségek színeképe véges és valós, meghatározásunk (7) fölhasználásával így foglalható képletbe:

$$\Phi(\omega) = \lim_{B \rightarrow 0} \frac{1}{B} \left\{ \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T |f_{B, \nu_0}(t)|^2 dt \right\} \quad (8)$$

ahol B a vizsgálati frekvenciasáv, T a vizsgálati időtartam, $f_{B, \nu_0}(t)$ pedig azt jelzi, hogy jelfüggvényünket a $\nu_0 = \frac{\omega_0}{2\pi}$ középfrekvenciájú, B sáv szélességű szűrőn keresztül vizsgáljuk. A sáv szélességgel való osztás az adatok normálása érdekében kívánatos. A valóságban a határátmenetek nem végezhetők el, mert a szűrők frekvencia-szélessége is és a vizsgálati idő véges. Ezért $\Phi(\omega)$ általában csak közelítőleg határozható meg.

Az energia-színkép fogalmát szigorúan sztochasztikus időbeli folyamatok színképének ábrázolására vezették be. Az ilyen színkép folytonos és időben állandó. Ha a teljesen rendezetlen jelfüggvény elég hosszú ideig állandósult állapotban van, a keresett színkép könnyen meghatározható. Ilyenkor mindegy, hogy a rövid idejű amplitúdó-színkép négyzetét átlagoljuk hosszabb időre, vagy magát a (8) definíció szerinti hosszú idejű energia-színképet állítjuk elő, vagyis ilyenkor

$$|F(\omega, t)|^2 = \overline{\Phi(\omega, t)} = \Phi(\omega) \quad (9)$$

A valóságos beszédfüggvény $\Phi(\omega t)$ értékeit azonban csak korlátozott pontossággal tudjuk képezni, s ezért hosszú időre átlagolva is csak megközelítőleg állíthatjuk elő a $\Phi(\omega)$ függvényt. Eltekintve az önkorrelációs függvény adta lehetőségtől, az átlagos energia-színképet mindig a szűrt jelfüggvényből határozzuk meg.

Érdekes, hogy a technikai nehézségek ellenére is a rövid idejű színkép meghatározására elég sok megoldást ismerünk. Ezekkel a módszerekkel a beszéd folyamatos elemzése terén is sok eredményt lehetett elérni. A gyakorlatban bevált megoldásmódok általában három nagy csoportra oszthatók: a keresőhangos, a mozgó szűrős és a párhuzamos szűrős elemzésre.

A keresőhangos elemzés során folytonosan változó frekvenciájú szinuszos jelet keverünk multiplikatív módon a vizsgálandó folyamathoz. A keverés után kapcsolt mélyáteresztő szűrőn csak a vizsgálandó folyamat és a keresőhang első különbségi hangja jut át, amelynek nagysága arányos a vizsgálandó jelfüggvénynek a keresőhang frekvenciáján jelentkező amplitúdójával. Az átjutott jel négyzetre emelésével éppen a pillanatnyi energiaszínkép adódik, amelynek hosszabb időre vett átlaga a számunkra érdekes adat.

A másik módszer szerint a teljes átviteli frekvenciasávot több párhuzamosan kapcsolt sávszűrővel tartományokra osztjuk. A szűrők kimeneti oldalán kapott jeleket négyzetes jelleggörbéjű rendszeren visszük át, majd ugyancsak elektronikus eszközökkel rövidebb időintervallumban átlagoljuk. Az egyes sávokba eső átlagolt energiaértékeket számoljuk vagy regisztráljuk a hosszabb időre újra átlagoljuk.

A két módszer bizonyos értelmű egyesítése a mozgószűrős elemzési eljárás. Egyetlen, állandó sáv szélességű szűrő középfrekvenciájának folyamatos változtatásával mindig az elemzendő hangjelenségnek éppen a szűrő sávba eső energia-tartamára nyerünk felvilágosítást.

A beszédre, mint folytonos változásban levő kvázisztochasztikus folyamatra az említett eljárások azért nem alkalmazhatók, mert a beszédfüggvény többek között a Fourier-integrálok létezésének elegendő feltételét sem elégíti ki. Ezért a röviden vázolt elemző eljárásoknak a beszédfüggvényre alkalmazását részletesebben kell taglalnunk. Az elemzések matematikája az irodalomból [18, 19, 20] jól ismert, a képleteket csak az érvelés folyamatossága érdekében közöljük.

3.2. Az (1) egyenlettel kapcsolatban említett $h(t)$ idő-ablak függvény (súlyfüggvény, emlékező függvény) voltaképpen a hallás emlékezési folyamatára való hivatkozással került be az egyenletbe. Lényegében arról van szó, hogy a t_0 időpillanatban végzendő elemzés során a múlt adatok mind kisebb fontossággal vesznek részt az agy munkájában. Ahogy t_0 az idő változásával jobbra tolódik, a régi t_0 helyek a múltba kerülnek, amit a negatív idők irányában csökkenő $h(t)$ függvénnyel írunk le. Ilyen függvény pl. a

$$h(t) = \begin{cases} e^{-\alpha(t_0-t)}; & \text{ha } t \leq t_0 \\ 0; & \text{ha } t > t_0 \end{cases} \quad (10)$$

ahol $1/\alpha = \Delta t$ az elemzési intervallum, vagy másként az elemzési időállandó. A hallás-elemzésben a múltba mutató időirány nemcsak logikailag, hanem kísérletileg is indokolható. Fordítva visszajátszott szövegben egyes hangok, különösen a zöngés zárhangok (b, d, g) teljesen érthetatlenné válnak, de mások is nagyon furcsán hangzanak.

A matematikai felírásban és természetesen a technikai elemzésben is a t_0 eltolódása a futó idő és ezért az „elemzési idő” jelölésére új változót kell bevezetni. Így kapjuk az (1) egyenletet, ami a változó transzformálásával (átfordítással és eltolással)

$$F(\omega, t) = \int_0^{\infty} f(t-\lambda)h(\lambda)e^{j\omega\lambda} d\lambda \quad (1a)$$

alakban is megadható. A futó idő szerinti integrálás azonban természetesen mindenképpen mínusz végtelentől a jelenig tart. Ez a tény a Fourier-transzformációt helyezi előtérbe a feladat megoldása szempontjából a jövőre érvényes Laplace-transzformációval szemben.

A technikai megoldásokban az emlékező függvénynek fontos fizikai jelentése van. Valamely lineáris rendszer, pl. szűrőkör, a rajta áthaladó jelet saját átviteli jellege — a $H(j\omega)$ rendszerfüggvény — értelmében módosítja. Stabilis szűrőkörökre matematikailag nem nehéz bizonyítani [21], hogy ha a bemenő jel a Dirac-féle impulzus-függvény, amelynek szinképe $F(\omega)=1$, akkor a rendszerfüggvény és a súlyfüggvény (idő-ablak függvény) egymás Fourier-transzformáltja.

A szűrőkörös technikai megoldások annyiban természetes megfelelői a hallással való elemzésnek, hogy a megfelelő idő-ablak függvény az átviteli rendszerek tulajdonságai következtében önmagától megvalósul.

A keresőhangos elemzés megformulázásához az (1) egyenlet komplex alakját vesszük figyelembe:

$$F(\omega, t) = \int_{-\infty}^t f(\lambda) \cos \omega\lambda h(t-\lambda) d\lambda - j \int_{-\infty}^t f(\lambda) \sin \omega\lambda h(t-\lambda) d\lambda = a(\omega, t) - jb(\omega, t) \quad (11)$$

Nyilvánvaló tehát, hogy

$$|F(\omega, t)|^2 = [F(\omega, t) \cdot F^*(\omega, t)] = a^2(\omega, t) + b^2(\omega, t). \quad (12)$$

A fázisra az elemzéskor nem vagyunk tekintettel, azaz vagy csak az a^2 , vagy csak a b^2 meghatározására szorítkozunk. Ez ismét a hallás sajátágaival indokolható. A hallásban a fázis csak periódusosan ismétlődő impulzusjelek észlelésekor játszik szerepet, s ilyen a beszédhangok között nincs.

A (11) és (12) egyenlettel jellemzett keresőhangos elemző úgy dolgozik, hogy a jel a lassan változó $\sin \omega t$ keresőhanggal szorozódik (multiplikatív keverés), ami az $f(t)$ színeképét mintegy lassan eltolja a szűrő $H(j\omega)$ áteresztési sávja előtt. A szűrő általában mélyáteresztő, tehát amikor a keresőhang az $f(t)$ frekvencia-összetevői közelébe kerül, a szűrő kimeneti kapcsain a színeképi amplitúdóval arányos különbségi hang jelentkezik.

Fontos probléma az elemzés időbeli felbontóképessége. A Gábor—Shannon relációt a frekvencia—idő színekép vonatkozásában legtöbbször [22]

$$\Delta\nu \cdot \Delta t \cong 1 \quad (13)$$

alakban szokás megadni. A mélyáteresztő szűrő általában 20 Hz szélességű, tehát időbeli felbontóképessége 50 ms.

Bár a keresőhangos elemzés elég jó frekvenciafelbontást tesz lehetővé, azonban nagy az elemzési időszükséglete. Az ún. „Salinger-feltétel” szerint [18] ideális mélyáteresztő szűrő esetén 25% amplitúdó-hibát megengedve — a keresőhangos elemzési sebesség nem lehet nagyobb, mint a szűrő sáv szélességének négyszete:

$$\gamma = \frac{d\nu}{dt} < (\Delta\nu)^2 \quad (14)$$

A szokásos megoldásokban $\Delta\nu \sim 20$ Hz, tehát $\gamma = (\Delta\nu)^2 = 400$ Hz/s. Ha $\nu \sim 10\,000$ Hz frekvenciáig kívánjuk az elemzést kiterjesztetni, az időszükséglet

$$T > 10\,000/400 = 25 \text{ s,}$$

ami a feladat megoldása szempontjából nyilvánvaló abszurdum, hiszen 25 s alatt 100...120 szótagos szöveg mondható el.

A taglalás végső eredménye, hogy feladatunk megoldására, az átlagos energia-színekép meghatározására a keresőhangos elemzési módszer nem használható.

3.3. A mozgószűrős eljárás a berezgési idő és az elemzési idő szempontjából a keresőhangos elemzéshez hasonlóan tárgyalható. Az információt szolgáltató jel keletkezése szempontjából a tárgyalás a párhuzamos szűrőkörökével azonos.

A sávszűrők szélessége és a berezgési idő összefüggését szolgáltató (13) egyenletlenség jobb oldalára célszerű 2-t helyettesíteni [23]. A $(\Delta\nu)$ ugyanis a középfrekvenciától számítandó, s így $B = 2(\Delta\nu)$. Ezzel az összefüggéssel számolva pl. a Kay-féle Sona—Graph kétféle mozgó szűrőjére (45 Hz és 300 Hz), az időbeli felbontás 45 ms, ill. 6,7 ms. Az előbbi a magánhangzókhoz és kitartott mássalhangzókhoz, az utóbbi a zárhangokhoz (p, t, k, b, d, g) és az affrikátákhoz (ts, tf, dz, dʒ) megfelelőbb, egyenkint azonban nem képesek minden feladat megoldására.

A 300 Hz-es színeképi felbontás 1000 Hz alatt már elégtelen, viszont a beszédhangok egy részére a 45 ms-os idő felbontás túl durva. Az utóbbi főként a rövid idejű elemzéskor okoz hibát.

Az állandó sávszélességű mozgó szűrős elemzés időszükséglete a keresőhangos elemzésével összemérhető. Ha azonban pontosabb adatokat kívánunk, pl. a hiba mértékét kisebbre akarjuk leszorítani, az időszükséglet négyzetesen növekszik. Általában (14) helyett a

$$\gamma = \frac{dv}{dt} < 4\varepsilon^2 B^2 \quad (14a)$$

összefüggés adja meg az elemzési sebesség értékét, ahol ε az amplitúdó hibája. Pl. $B=40$ Hz sávszélességű szűrő és $\varepsilon=5\%$ kívánság mellett az előző elemzés időszükséglete

$$T > 10\,000/16 = 625 \text{ s.}$$

Mindkét esetben javítható azonban a helyzet, ha a vizsgálandó szöveget végtelenített szalagra vesszük és sokszorosan visszajátsszuk. Ekkor a keresés sebességét tetszőlegesen lassúra választhatjuk, mégis mintegy egyszerre elemezzük az egész fölvetett szöveget. Tovább növelhetjük a berendezés hatásfokát, ha a felvételt kis szalagsebességgel készítjük, az elemzéshez viszont nagy sebességet használunk. Mindezen javító változtatások ellenére sem mondható túl eredményesnek a módszer. A technika mai állása mellett (Kay-féle Sona—Graph) 2,5 s időintervallum rögzített jelsorról utólagosan néhány perc alatt rövid idejű színeképek készíthetők. A nyert képek azonban nem alkalmasak átlagolásra és így az átlagos beszédszínekép meghatározására sem.

3.4. A párhuzamos szűrős elemzés matematikai megfogalmazásához a rövid idejű színekép formuláját az (1/a) egyenlet alakjában írjuk föl:

$$\begin{aligned} F(\omega, t) = e^{-j\omega t} \left\{ \int_0^\infty f(t-\lambda)h(\lambda) \cos \omega\lambda d\lambda + \right. \\ \left. + j \int_0^\infty f(t-\lambda)h(\lambda) \sin \omega\lambda d\lambda \right\} = e^{-j\omega t} [a'(\omega, t) + jb'(\omega, t)] \end{aligned} \quad (15)$$

Ekkor tehát

$$|F(\omega, t)|^2 = [F(\omega, t) \cdot F^*(\omega, t)] = a'^2(\omega, t) + b'^2(\omega, t) \quad (16)$$

ismét előállítható. Ezúttal két fáziskiegyezítő keskenysávú szűrőt kell alkalmaznunk, amelyek impulzusráfelelése a legegyszerűbb esetben $e^{-\alpha t} \cos \omega t$ és $e^{-\alpha t} \sin \omega t$. Az exponenciálisan csökkenő

$$h(t) = \begin{cases} e^{-\alpha t}; & \text{ha } t \geq 0 \\ 0; & \text{ha } t < 0 \end{cases} \quad (17)$$

függvény az új idő-ablak függvényünk időbeli burkolója.

Megjegyzendő, hogy a szűrők sávszélessége kétszeres az azonos $h(t)$ függvénnyel válaszoló mélyszűrő sávszélességének. A (17) egyenlet nem más, mint a (10) összefüggés pozitív irányba mutató alakja. A technikai megoldásokban természetesen annyi szűrőpárt kell alkalmaznunk, ahány helyen a színeképet ismerni akarjuk.

A mérési módszer ismét egyszerűsíthető, ha a (16) egyenletben megelégszünk akár az $a'^2(\omega, t)$, akár $b'^2(\omega, t)$ időbeli burkolójának mérésével. Ekkor ugyan

a fázismeghatározás lehetőségétől ismét elesünk, de lényegesen egyszerűbb berendezéssel, egyetlen szűrősorozattal dolgozhatunk. A módszer jogosultsága matematikailag is igazolható, feltétele mindössze annyi, hogy a szűrő elég keskeny sávú legyen, vagyis $h(t)$ szinképe ne lapolja át ω értékét, vagyis, hogy a $B/v_0 < 1$ egyenlőtlenségnek kell teljesülnie, ahol v_0 a szűrőtartomány geometriai középértéke. A gyakorlati elemző berendezések vagy állandó sáv szélességű, vagy állandó sávarányú (oktáv, féloktáv vagy terc szélességű) szűrőkkel készülnek. Az utóbbiakat azért szoktuk előnyben részesíteni, mert a B/v_0 arány a frekvenciától függetlenül azonos, míg állandó sáv szélesség mellett a kis frekvenciák irányában a feltétel miatt korlátozva vagyunk.

A véges sáv szélesség kérdésével még tovább kell foglalkoznunk. A (8) definíció szerint $\Phi(\omega)$ végtelen keskeny sáv szélességre van meghatározva, az $F(\omega, t)$ függvényt viszont véges sáv szélességű szűrőkkel mérjük. Így a (9) egyenlőség nem áll fenn, hanem

$$\begin{aligned} \overline{|F(\omega, t)|^2} &= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T [F(\omega, t) F^*(\omega, t)] dt = \\ &= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_{-\infty}^t dt \int_{-\infty}^t f(\lambda) h(t-\lambda) e^{-j\omega\lambda} d\lambda \int_{-\infty}^t f(\vartheta) h(t-\vartheta) e^{-j\omega\vartheta} d\vartheta \end{aligned} \quad (18)$$

értékét kell meghatároznunk. A jobb oldal változóinak transzformálásával és átrendezésével kimutatható [24], hogy ott éppen a $\varphi(\lambda-\vartheta)$ korrelációs függvény szerepel. Ez viszont a (6) egyenletben megadott Wiener—Khintchine reláció szerint a keresett $\Phi(\omega)$ függvény Fourier-transzformáltja. Végül is

$$\overline{|F(\omega, t)|^2} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(\Omega) d\Omega \int_0^{\infty} h(\lambda) e^{j\lambda(\omega-\Omega)} d\lambda \int_0^{\infty} h(\vartheta) e^{-j\vartheta(\omega-\Omega)} d\vartheta. \quad (19)$$

Mivel pedig a rendszerfüggvény és súlyfüggvény összefüggése szerint a jobb oldalon a $H(\omega-\Omega)$ és a konjugált komplex $H^*(\omega-\Omega)$ ismerhető fel, tehát

$$\overline{|F(\omega, t)|^2} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(\Omega) |H(\omega-\Omega)|^2 d\Omega. \quad (20)$$

A (20) egyenlet jelentése: minden ω értékre $|F(\omega, t)|^2$ egyenlő az ω körüli $|H(j\omega)|^2$ nyíláson át „szemlélt” energiaszinkép integráljával. Ez más szóval azt jelenti, hogy a jelfüggvénynek a szűrőszámba eső átlagos teljesítményét határoztuk meg, ami a sáv szélességgel való osztás után azonos a (8) szerinti definícióval. A (20) egyenlet tehát a valóságos technikai megoldások következtében lép a (9) örökébe. Minél keskenyebb a $|H(j\omega)|^2$ szinkép, annál jobban megközelíti $|F(\omega, t)|^2$ a valóságos átlagos energiaszinképet. Határesetben, ha $H(j\omega)$ éppen egyetlen szinképvonal, a neki megfelelő $h(t)$ ablakfüggvény a végtelen időre bekapcsolt egységfüggvény és a (9) egyenlet érvényes.

A (20) levezetésében felhasználtuk a Wiener—Khintchine relációt, ami beszéd-függvény esetén nem tekinthető korrektnek, s ezért a (20) összefüggés is óvatosan kezelendő. A valóságban a mérések úgy történnek, hogy a párhuzamos szűrősorozatból érkező $a'(\omega, t)$ jeleket négyzetesen egyenirányítjuk és egy közepes időtartamra

(100...200 ms) átlagoljuk. Ez az átlagolás részben az egyenirányítás szűrőköri időállandójának (mélyáteresztő szűrő), részben a regisztrálás tehetetlenségének a következménye [25]. Ez után az átlagolás után a kapott értéket akár hosszú időállandójú összegező műszerrel, akár számoló berendezésekkel szűrőkörönként regisztráljuk.

A párhuzamos szűrős elemzés az eddigiek szerint alkalmas kitűzött feladatunk megoldására, de számos hátrányos oldala van.

a) A közepes idejű átlagolás időállandójának hosszabbnak kell lennie, mint a szűrőkörökének. Ezért a szűrőket elég széles sávúnak kell választani. Az eredmények szempontjából ez annyiban hátrányos, hogy a színek felbontása durvává válik. Pl. Dunn és White [3] sokszor idézett kísérletében 500 Hz fölött fél-oktáv, alatta oktáv szélességű szűrőket használt. A színekpi felbontás különösen a mélyhangú tartományban gyöngé.

b) A módszer további hátránya a nagy műszerszükséglet. Az említett kísérletben 12 párhuzamos szűrőrendszer és ugyanannyi regisztráló berendezés volt működésben.

c) Ahhoz, hogy a beszéd egészére vonatkozó átlagos színeképet megkapjuk, igen hosszú elemzést és középértékelést kell végezni. A [3] cikkben közölt 2,5 perces földolgozások még mindig nem adják meg a végtelen időátlagban érvényes színeképet. Vegyük még hozzá, hogy más beszélő személlyel újra ugyanannyi ideig meg kellett ismételni a kísérletet és több személyre újabb középértéket számítani. Nem csodálatos, hogy a szerzők összesen csak 5 nő és 6 férfi beszédét dolgozták föl.

d) A viszonylag rossz jel/zaj viszony miatt a halk hangok és a szünetek elemzési adatai hibát okoznak. Ez egyben mindkét irányban korlátozza az elemzési frekvenciák kiterjesztését. Az ismertetett esetben, amely az előtünk végzett legnagyobb felkészültségű és legpontosabb méréssorozat volt, a két szélső frekvencia-közép 90 Hz, ill. 9500 Hz (az utóbbi már nem volt mindig mérhető).

A módszer mérési bizonytalanságát jól szemlélteti az a tény, hogy amikor *N. R. French* és *J. C. Steinberg* 7 év múlva [4] ugyanazzal a módszerrel, sőt ugyanazzal a berendezéssel megismételte *Dunn* és *White* méréseit, azoktól meg nem indokolható eltéréseket észlelt. Így pl. a 630...1250 Hz közötti oktávban saját méréseik átlagosan +5 dB-lel (szélső esetben +7,5 dB-lel) tértek el a korábbiaktól.

3.5. Az ismertetett színek meghatározási módszereket kritikailag elemezve azt látjuk, hogy a kitűzött feladat megoldására vagy egyáltalán nem alkalmasak (keresőhangos elemzés), vagy csak kompromisszumok árán, elég nagy hibavalószínűséggel használhatók (párhuzamos szűrős elemzés). A kompromisszumot az jelenti, hogy a valójában kvázisztochasztikus folyamatot matematikailag is és mérés technikailag is úgy kezeljük, mintha az teljesen rendezetlen, szigorúan sztochasztikus folyamat volna.

A 3.4. pontban röviden vázolt megfontolások világossá teszik, hogy mérés-technikailag a probléma nem kerülhető meg. Az ismertetett módszerekkel csak akkor kaphatnánk meg a valóságos hosszú idejű átlagos energia-színeképet, ha az időbeli és színekpi felbontás egyszerre lehetne kellő finomságú. A szűrőkörös megoldások azonban a bizonytalansági relációnak megfelelő Gábor—Shannon-féle (13) összefüggés értelmében a kívánt kettős felbontási pontosságot nem érhetik el.

A nehézségek legyőzésére két lehetőség kínálkozik. Az egyik a korrelációs elemzéssel való mérés, ahol a mérés frekvencia-szelektivitása csaknem tetszés szerinti értékre fokozható [16] és ugyanakkor az időfelbontás csak a számológépek sebességével korlátozott. Ez a technika azonban nagy mértékű műszer igényessége miatt még a Bell-laboratóriumban sem került kísérleti megvalósításra.

A másik út a beszédfüggvény sztochasztikus folyamatá váló átalakítása. Ekkor a szűrőkörös eljárások (akár keresőhangos, akár párhuzamos szűrős) minden nehézség nélkül alkalmazhatók bármilyen színek mérésére. Az összes eddigi probléma elesik, mivel ez esetben a sztochasztikus folyamat színeképe időben nem változik, csak egy jól meghatározható középérték körül kis mértékben ingadozik. A mérés tehát sokkal pontosabbá válik. Azonfelül nincs szükség hosszú idejű átlagolásra; a mérés időtartama csak a legkeskenyebb szűrő berezgési idejével korlátozott. A mérés tehát észrevehetően meggyorsul. Végül a szigorúan sztochasztikus folyamat megengedi a párhuzamos szűrők helyett a szűrők időben egymás után való bekapcsolásával való mérést és a méréshez egyetlen regisztráló műszer alkalmazását. Ez a kísérletezést egyszerűvé és olcsóvá teszi.

Ez a hármas előny várható a beszéd sztochasztikus folyamatá váló átalakításából. Az átalakítást a következő gondolat alapján hajthatjuk végre. Ne egyetlen ember beszéljen, hanem egyszerre több. A szöveg ne legyen azonos és a beszélők egymást ne zavarják (statisztikai függetlenség), egyes személyek hangja ne legyen a többihez képest túl erős. A beszélő személyek száma annyi legyen, hogy szóközi vagy mondatközi szünetek az általános zajból ne legyenek kihallhatók. Mindezek a feltételek valószínűsítik, hogy a keletkezett hangjelenség sztochasztikus időbeli folyamat. Az eljárás a fentebb említett hármas előny mellett negyedikként a több személy beszédére való átlagolást is tartalmazza. A továbbiakban ezen „beszédkórus-tételnek” nevezhető állítás tézisszerű megfogalmazásával foglalkozunk.

4. A beszédkórus-tétel

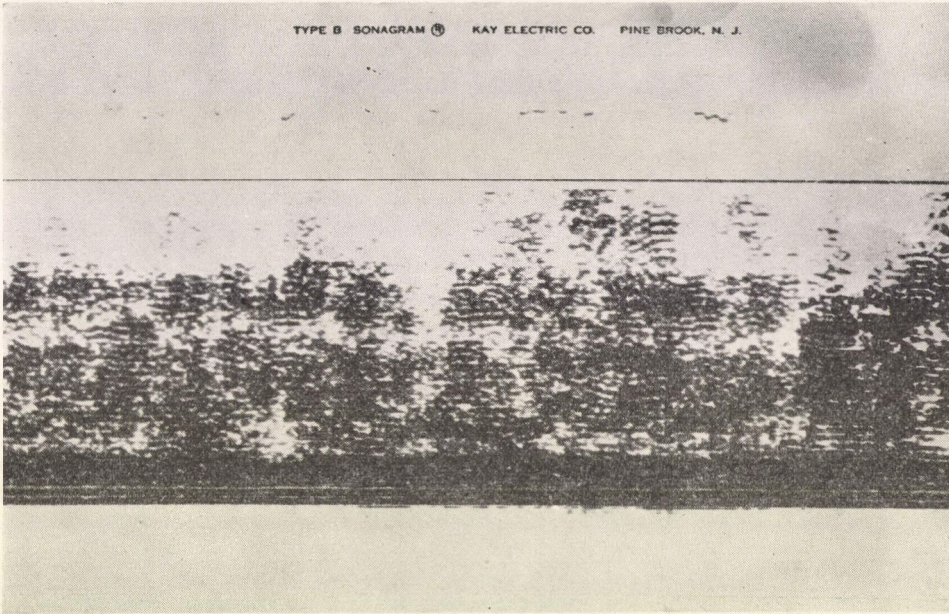
4.1. Tézis: *Több személy egyidejű beszéde esetén — amennyiben a szövegek egymástól teljesen függetlenek — a beszélők számának növelésével a keletkezett akusztikai jelenség időfüggvénye mind inkább megközelíti a kontinuos, stacionárius, szigorúan sztochasztikus folyamatok jellegét.*

Ha e tézis igaz, a színek szűrőkörös meghatározása helyes eredményhez vezet. Ez a 3. pont tárgyalásából is világos, meg az irodalomból is általánosan ismert. Hasonló folyamatok, pl. az ellenállás-zaj, a sörét-zaj, az „s” beszédhang zöreje, a dobverővel pergetett réztányér hangja, szintén így elemzendők. A felsorolt példák között olyanok is vannak, amelyek makroszkóposan több forrás keltette folyamat (az elektronok szabálytalan ütközései) szuperpozíciójaként értelmezhetők. Ilyen a beszédkórus is, azzal a különbséggel, hogy az elemi folyamatok (az egyes emberek beszédfüggvényei) nem minden szempontból azonos természetűek. Nem szólva arról, hogy minden embernek más a hangszíne és egyéni hanghordozása, a kor, nem és nyelv szerinti színeképben igen nagy eltérések képzelhetők el. Amidőn tehát a beszédkórus-tételt kimondjuk, tudatában vagyunk annak, hogy az együttes folyamat konvergenciájának „siettetése” érdekében a csoportok megválasztásában gondosan kell eljárunk.

4.2. Első melléktézis: *A beszédkórus időfüggvénye kontinuos akusztikai folyamat.*

Maga a beszéd szünetekkel megszakított, tehát diszkontinuos folyamat. A mérőberendezések integrálási ideje miatt a szünetek közül általában csak a 30...50 ms-nál hosszabb idejűek mérhetők. Ezek nemcsak szóközi, sőt sokszor elsősorban éppen

szavakon belül jelentkező szünetek. De diszkontinuitást mutat a beszédhangok pillanatnyi színe is (formáns-tartományok). Mindez bármely szonogramon közismerten jól látható. Összehasonlításként szemléltetés céljából a 2. ábrán egy 8 tagú beszédkórus szonogramját mutatjuk be. A színek viszonylagos homogenitása teljesen meggyőző.



2. ábra. Egy 8 személyes (olasz férfi) beszédkórus szonogramja. A vízszintes tengely az idő (2,5 s) a függőleges tengely frekvencia (85 ... 8000 Hz) és a feketedés az illető helyen 45 Hz sávszélességben jelentkező intenzitással arányos

Saját régebbi méréseim szerint [26] a magyar beszéd átlagos szótagideje a beszéd sebességétől függően az I. táblázat szerint alakul. A folyamatot megszakító szünetek összideje azonban a beszéd sebességnövelésével nagymértékben csökkenthető. Ha a mérhető szüneteket, amelyek a táblázatban szintén közlünk, az összidőből levonjuk, a nyers szótagidő a beszéd sebességével alig változik.

A nagyon gyors beszéd tehát már nagyjából folyamatosnak tekinthető, ugyanakkor a színekpi alakja valószínűleg nem változik észrevehetően, mert a szótagok

I. TÁBLÁZAT

A magyar beszéd átlagos szótagideje a beszédsebesség függvényében

	Lassú hangsúlyos	Közepes sebességű	Nagyon gyors
Átlagos szótagidő (ms)	208	161	139
Hangközi szünetek (%)	26	12	2
Szótagidő a szünetek levonásával (ms)	154	144	136

II. TÁBLÁZAT

Kockadobás sorozatok szuperpozíciója
logaritmusos összegezéssel

sorozat	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20
1	0	0	11	11	0	18	16	13	20	0	18	14	14	15	16	12	16	0	12	17
2	3	13	12	20	0	19	0	15	0	0	13	10	21	14	9	18	11	12	12	12
3	18	18	17	0	20	10	0	5	15	16	18	11	0	11	14	11	10	18	16	10
4	13	16	12	10	10	14	10	18	18	18	15	10	19	9	13	13	18	0	14	8
5	19	13	7	18	17	15	0	12	0	11	16	18	17	7	0	15	14	12	12	0
6	0	0	12	22	0	14	8	6	14	15	12	6	7	0	19	12	11	12	14	9
7	9	0	17	0	15	16	18	14	7	12	11	17	13	12	17	11	0	19	20	15
8	8	17	6	12	13	18	9	15	8	11	20	15	0	14	10	16	19	6	17	15
9	14	15	9	15	7	0	20	12	16	13	0	11	12	12	12	16	11	19	0	12
10	12	19	11	17	12	0	11	8	5	16	20	9	10	14	18	17	13	12	16	0
11	6	12	0	6	15	16	12	16	19	15	13	0	14	12	9	12	15	10	15	8
12	11	11	12	17	7	15	10	0	13	15	12	14	17	20	16	8	8	15	14	10
13	0	9	14	13	7	13	18	14	15	0	16	21	13	10	15	11	17	11	13	10
14	6	10	10	14	11	7	10	18	10	10	14	12	0	10	7	0	0	20	14	15
15	12	21	18	16	9	13	12	0	9	12	18	16	12	17	20	12	15	0	14	8
16	9	13	11	15	13	11	17	8	12	17	13	12	11	0	9	21	13	18	20	17
17	13	14	11	12	15	13	9	9	0	17	11	10	14	15	11	17	11	14	16	13
18	17	12	16	13	12	15	12	17	0	17	19	16	10	0	8	20	15	0	19	10
19	9	14	0	13	9	6	11	9	9	14	16	13	19	17	10	9	20	12	18	11
20	17	11	14	16	19	13	11	13	9	14	0	13	16	24	6	16	9	9	15	17
log- közép	25,9	27,5	26,1	28,5	26,7	27,0	26,5	26,5	26,5	27,2	28,8	27,1	27,9	28,2	27,1	28,7	27,6	27,5	29,0	26,1

alig rövidülnek. A folyamatosság elérése érdekében azonban nem szükséges ehhez a fogáshoz nyúlnunk, ha beszédkórust szóltatunk meg. A valószínűségtan elemeiből ismeretes, hogy diszkontinuitásokat tartalmazó statisztikailag független folyamatok összeadásával a diszkontinuitások eltűnnek. Az irodalomból számos ilyen „kockadobási” példa ismeretes [27]. Az elv bemutatására itt is összeállítottunk egy sort, amelyet részben az állandósult állapot elérésének szemléltetésére is fel szeretnénk használni.

A példa a következő. Összesen öt kockával dobunk. Az egy kockával dobható értékek 0...5 közöttiek (a 6-os oldal 0-nak számít). Az első kockát vezérkockának tekintjük, amelynek 0 dobása az összes többi dobott eredményt megsemmisíti. Egyébként a dobott adatokat mindig összeadjuk. Húsz dobást tekintünk egy mintának. Ezután új mintát készítünk, összesen húsz darabot. Végül a dobott eredményeket dB-nek tekintve, a logaritmus értékek összeadási szabályai szerint a húsz mintát összegezzük.

A példa nagyjából a beszédfüggvény szintdiagramját utánozza, 16,5% szünettel. A dobások eredményei a II. táblázatban találhatók. Az adatok még messze nem mutatják a statisztikai megoldást. (Pl. 0 értéknek kb. 66-szor kellett volna megjelennie, s helyette csak 47-et találunk stb.) Ennek ellenére a diszkontinuitások teljesen eltűntek. Sőt, a példában nem tudunk 5 olyan mintafüggvényt kiválasztani, amelyek összege még tartalmazna diszkontinuitást.

A jelenség annyira plauzibilis, hogy a kockadobásos bizonyításra tulajdonképpen nincs is szükség. A példa bemutatása inkább a dB-szerinti összegezés miatt érdekes. Az agy ugyanis sok kísérleti eredmény tanúsága szerint nagy valószínűséggel így összegezi az egyszerre érkező jelfüggvények pillanatnyi értékeit. Ezért használunk az akusztikai folyamatok regisztrálására logaritmusos műszert, amely a II. táblázatban közölt példához hasonlóan szintén logaritmusosan végzi a jelértékek összegezését.

A közvetlen kísérleti bizonyítást a 3. ábrán szemléltetjük. Az ábra négy szintdiagramján egy férfi beszédét, valamint négy és nyolc férfi beszédkórusát rögzítettük. A diszkontinuitások elmaradását illetően külön megjegyzést nem látunk szükségesnek, azonban a stacionárius állapot tárgyalásakor még visszatérünk az ábrára.

Mindezek alapján az első melléktézist plauzibilis megfontolások és kísérleti bizonyítékok alapján bizonyítottnak tekinthetjük.

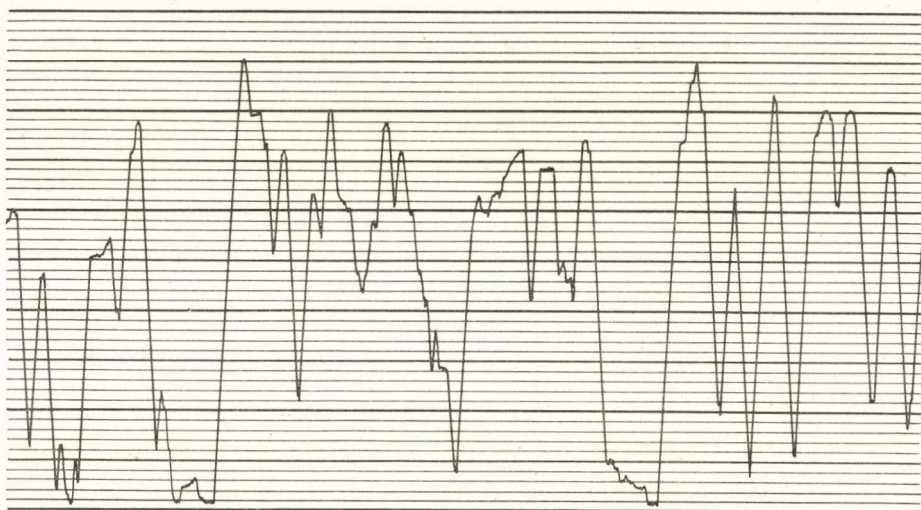
4.3. Második melléktézis. *A beszédkórus időfüggvénye stacionárius akusztikai folyamat.*

A stacionárius állapot definíciója értelmében az időbeli középérték és az eloszlási sűrűség időtől való függetlenségét kell belátnunk.

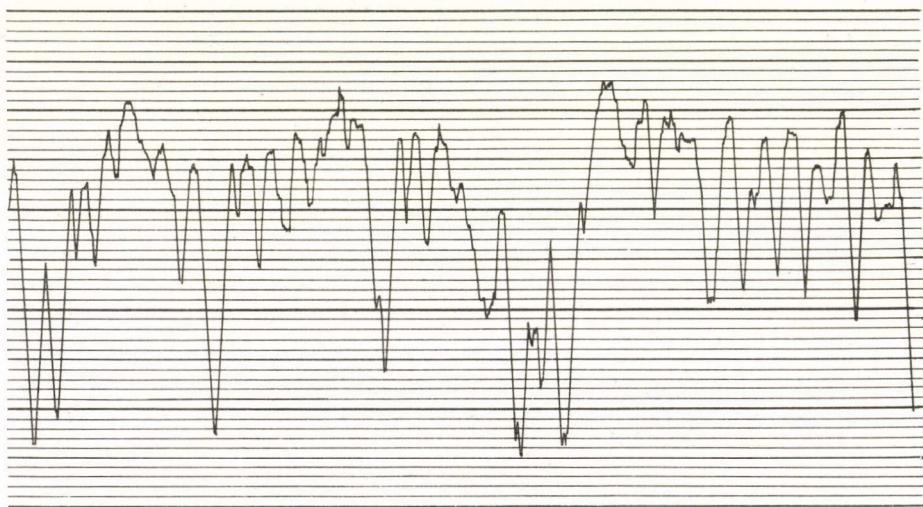
A kockadobási példában az alsó, logaritmusosan összegezett sor $\pm 1,6$ dB maximális ingadozása világosan szemlélteti az időbeli középérték állandóságát, ha 20 mintafüggvényt összegeztünk. Beszéd esetén a helyzet még kedvezőbb. A 3. ábrán közölt regisztrált darabok mintegy 6 s terjedelműek. A négy személyes beszédkórus szintdiagramja középértékben már akár rövid, akár hosszú idő alatt alig mutat változást. Hasonlóképpen, hosszabb idejű felvétel különböző helyeiről statisztikát készítve, a sűrűség eloszlásban sem találunk számottevő ingadozást.

Három sűrűség eloszlási statisztikát a III. táblázatban közlünk. A statisztikák az 1. ábrán közölt anyag felfolgozásához hasonlóan a Brüel és Kjaer-féle 4420 típusú statisztikus eloszlási elemzővel készültek. Az elemző tapogatója a Brüel és Kjaer-féle

4305 típusú szintíróra szerelhető. A teljes szintátfogás 12 érintkező sávra van osztva. Amikor az íróú valamelyik érintkezőnek megfelelő dB értéken áthalad, a megfelelő számláló egység jelet kap és egyet számol. A mintavétel periódusa a tű mozgási sebességétől függetlenül állítható; legkisebb értéke 100 ms. A számoló szerkezet tehát minden 100 ms-ban egyet számol, de mindig csak az a számláló egység lép

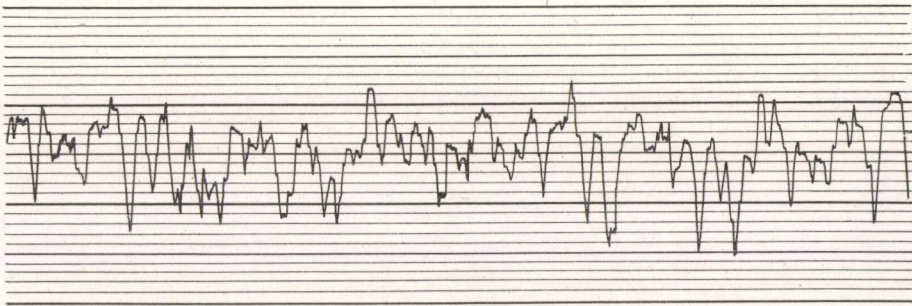


a)

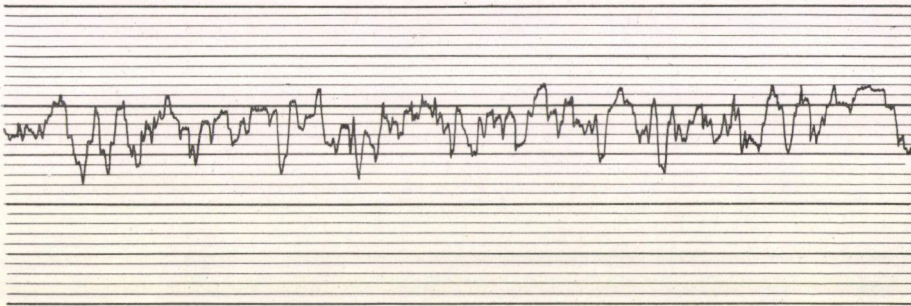


b)

3. ábra. Beszédről készült szintdiagramok. Vízszintes tengely az idő (6 s), a függőleges tengely pedig az intenzitás (50 dB). A diagramok rendre a) egy ember beszédének, továbbá b) két ember, c) négy ember és d) nyolc ember együttes beszédének (kórusának) szintingadozását mutatják.



c)



d)

3. ábra c és d képe

működésbe, amelynek érintkező mezején az írótü a számolás időpillanatában tartózkodik [13].

A 3. ábra és a III. táblázat elegendő kísérleti bizonyítékot szolgáltat a második melléktézis igazolására. A folyamat stacionárius voltából azonban további következtetéseket is levonhatunk. Ha ugyanis egy $f(t)$ függvény stacionárius és átlagos teljesítménye véges, akkor Fourier-színképe létezik és meghatározható [28]. Ennek a tételnek alkalmazása számunkra azért fontos, mert egy stacionárius sztochasztikus folyamat nem okvetlenül teljesíti a Fourier-transzformáció elegendő feltételét.

4.4. Harmadik melléktézis:
A beszédkórus időfüggvénye a beszélők számának növelésével mindinkább szigorúan sztochasztikus folyamattá válik.

III. TÁBLÁZAT

Sűrűségi statisztika 4 személyes beszédkórus 100 s időtartamú szintdiagramjából
(1000 adat)

Érintkező helyek	1. minta	2. minta	3. minta
0—4 dB	0	0	0
4—8 dB	0	0	0
8—12 dB	0	1	0
12—16 dB	3	0	1
16—20 dB	2	4	2
20—24 dB	6	8	5
24—28 dB	20	18	24
28—32 dB	89	86	80
32—36 dB	380	387	390
36—40 dB	437	416	430
40—44 dB	63	78	67
44—48 dB	0	3	1

Az eddigiekből is világos, hogy a szünetek betöltése egyik legfontosabb lépés a beszédkórus-tétel teljesüléséhez. Elemi meggondolás alapján 10...15%-os hangközi szünet esetén már 4 személy együttesében kb. 10^0_{00} -re csökken a szünetek összeesésének valószínűsége. Más kérdés azonban, hogy mikor tekinthetjük a kórusban egyszerre jelentkező hangcsoportokat minden időpontban azonos akusztikai sajátságú együttesnek.

Tekintsünk egy 200 ms-os (egy szótag átlagos időtartamának megfelelő) időállandójú regisztráló műszert. Négy személy beszédkórusában egy ekkora időtartamra eső szövegrészek pl. így alakulnak:

e v o l t
n g — — f
— a b l e
s t r a n

A műszer az együttes akusztikai sajátságait összesítve rögzíti, de még így is nagyon hiányos a nyelvben előforduló beszédhangokra vonatkozó statisztikai kép. Ezen akkor sem segíthetünk, ha 10 vagy 20 személyes beszédkórust állítunk fel.

Szerencsére a beszédhangok akusztikai jellege több, csoportos, közös saját-ságot tartalmaz. Pl. minden zöngés hang 3000...3500 Hz fölött közel azonos színpé-
képű, mert főként a hangrés gerjesztő hangjának sajátságait tükrözi. Minden rés-
hang (f, s, f, v, z, 3) zörejhang, tehát a fehér zajhoz hasonló színekpi jelleget árul el.
A magánhangzóknak, valamint a nazális hangoknak (m, n, ŋ, nj) is vannak fontos
közös sajátságai stb. Így szemlélve előbbi kezdetleges példánkat, már 4 személyes
kórus esetén is kedvező képet kapunk: 5 magánhangzó, 4 zárhang, 3 réshang, 3 fo-
lyékony és 2 orrhang, továbbá némi szünet tölti ki a 200 ms időtartamú együttest.
Ezek közös színekpe már durván megközelíti a beszéd átlagos színekpét. Világos,
hogy a kórus létszámának növekedésével a helyzet csak javulhat.

Ha a beszédzörejt időben tovább vizsgáljuk és az egyes 200 ms-os minták közép-
értékét és ingadozását tekintjük, a normális eloszlással rendelkező szigorúan szto-
chasztikus folyamatok jellegét ismerhetjük fel.

A normális eloszlással rendelkező folyamatoknak egyik fontos ismérve a közép-
értékek összegeződésének törvénye. Az ilyen folyamatok szuperpozíciójakor az
eredő középértéket az elemi folyamatok középértékeinek összege adja meg. Azonos
elemi középértékek és logaritmikus összegezés esetén az eredő középértékek a IV. táblá-
zat szerint alakulnak. A táblázatból látható, hogy kis létszámú kórusok nem tel-
jesítik a középértékek összegeződési törvényét, azonban a helyzet rohamosan javul

IV. TÁBLÁZAT

Azonos középértékű folyamatok logaritmikus
összegeződése (dB)

Folyamatok száma	1	2	4	8	10	16
Sztochasztikus törvény	0	3	6	9	10	12
Beszédkórus eredménye	0	6,1	8,4	9,5	10,2	12

és 8...10 fő ebből a szempontból már elegendőnek látszik. Említettük már, hogy a kórus bizonyos értelmű homogenitása (pl. csupa férfi) az összesített folyamat konvergálását siettet. Ugyancsak segítséget jelent a kísérleti személyek begyakorlása is. A IV. táblázat adatait csaknem teljesen gyakorlatlan kórusok felvételéből nyertük.

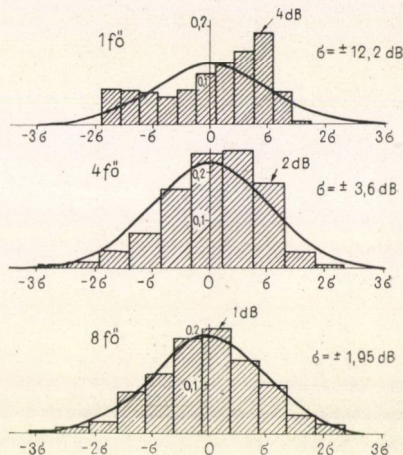
A folyamat sztochasztikus állapotára vonatkozó döntő bizonyítékot természetesen a sűrűség eloszlások vizsgálata szolgáltathatja. A 4. ábrán ezt igyekeztünk kísérleti úton kapott eredményekkel demonstrálni. Az ábrán közölt három eloszlási képet a második melléktézisben vázolt módon készítettük. A grafikonok rendre egyetlen személy, 4 fős és 8 fős kórus felvett szintdiagramjának ingadozásaiból készültek. Az egységes koordináták lehetővé teszik a képek közvetlen összehasonlítását, amihez még a berajzolt normális (Gauss-féle) eloszlási görbék is hozzásegítenek. A normális eloszláshoz való közeledés világosan látszik, és 8 személyes beszédkórus esetén már kielégítő mértékű.

A 4. ábrából ugyan közvetlenül már nem látható, de az adatokból kitűnik, hogy a kórustagok számának emelésével nemcsak a négyzetes eltérés, hanem az ingadozások teljes átfogása is rohamosan csökken. Ezt egyébként a 3. ábra szintdiagramjai is szépen szemléltetik.

Mindezekkel a kísérleti bizonyítékokkal a harmadik melléktézist is igazoltuk, s ezzel a beszédkórus-tétel bizonyítása befejezést nyert.

A sztochasztikus folyamatok elméletében ismeretes egy, a harmadik melléktézishez hasonló törvény: a központi határérték tétel [29]. Ez azt mondja ki, hogy bizonyos feltételek mellett bármilyen eloszlási függvénnyel rendelkező sztochasztikus folyamatok összegezése Gauss-féle eloszlás felé vezet; végtelen számú folyamat összegezése pontosan a Gauss-féle eloszlást eredményezi. Ezzel kapcsolatban nem érdektelen megjegyeznünk, hogy a központi határérték-tétel csak különleges esetekben bizonyított [30], és a beszédfüggvényhez hasonló kvázisztochasztikus folyamatokra egyáltalán nincs kimondva. A harmadik melléktézis kísérleti igazolásával a központi határérték tétel egy új — a kvázisztochasztikus folyamatokra kibővített — alkalmazását is valószínűsítettük.

Sztochasztikus folyamatok energia-színképének arányos sáv szélességű szűrőkkel való vizsgálatával elméletileg először *S. O. Rice* [31] foglalkozott a 40-es években, de a gyakorlati alkalmazások — különösen mechanikai viszonylatban — csak az 50-es évek vége felé értek be [32]. Egyes sztochasztikus jellegű beszédhangok energia-színképének 1954-ben [33], a beszédzörej átlagos energia-színképének pedig 1956-ban [11] közölt meghatározásával a beszéd kutatás területére is bevezettük ezt a fajta vizsgálati eljárást. Az irodalomban *Fant* [34] és *Meyer—Eppler* [35] ismerte fel először.



4. ábra. Sűrűség-eloszlási statisztikák a harmadik ábrán közölt a), c) és d) szintdiagramokból. A számlálások 500 s időtartamú darabokból készültek 100 ms-onkénti mintavétellel. A felső grafikonon megegyezik az első ábra megfelelő grafikonjával

az új módszer előnyeit. Az azóta meghonosodott „beszédkórus” elnevezést Meyer—Eppler használta először.

A beszédkórus-tétel lényeges elemei ugyan az idevonatkozó közleményekben [11] említésre kerültek, de bizonyítás nélkül maradtak. A most közölt megfogalmazás és kísérleti bizonyítás teljesen új. A három részre bontott tétel igazolása megalapozottá teszi a matematikai modell elfogadását. Közvetlenül következik belőle a folyamat ergodicitása, amit a normális (egyszemélyes) beszédfolyamatra nem tudunk bizonyítani. Következik továbbá, hogy a meg gondolások során a [29] egyenlet levezetésében a beszédzörej folyamatokra korrekt a Wiener—Khintchine reláció alkalmazása. Végül bizonyítottan lehetségessé és indokolttá válik az energia-színkép szűrőkörös mérése. Ami tehát a megelőző dolgozatokban csak sejtésként jelentkezett, a beszédkórus-tétel igazolása után valóban tételként kezelhető. A beszédkórus módszerrel elért újabb eredményeket egy későbbi dolgozatban [36] közöljük.

IRODALOM

1. I. B. Crandall—D. MacKenzie: Analysis of the energy distribution in speech. Phys. Rev. 19, 221—229, 1922.
2. L. J. Sivan: Speech power and its measurements. Bell. Syst. Techn. J. 8, 646—656, 1929. — J. Acoust. Soc. Am. 1 (S), 1—16, 1930.
3. H. K. Dunn—S. D. White: Statistical measurements on conversational speech. J. Acoust. Soc. Am. 11, 278—288, 1940.
4. N. R. French—J. C. Steinberg: Intelligibility of speech sounds J. Acoust. Soc. Am. 19, 90—119, 1947.
5. S. S. Stevens—J. P. Egan—G. A. Miller: Methods of measuring speech spectra. J. Acoust. Soc. Am. 19, 771—780, 1947.
6. I. M. Polkovszkij: Primerenije termisztora v priborach dlja polosznogo analiza sumovi recsi. Trudi Komisszii po Akusztike. Akad. Nauk. Sz.Sz.Sz.R. No. 7. 1953, 28—35. o.
7. Ju. Sz. Bükov: Szpektrálne charakterisztiki russzkoj recsi Trudi Komisszii po Akusztike. Akad. Nauk. Sz.Sz.Sz.R. No. 7, 36—39, 1953.
8. E. Skudrzyk: Die Grundlagen der Akustik. Springer, Wien 1954. 613 o. 306. ábra. — E. Steinkogler: Die Artikulationsbasis des Englischen, die Silbenstruktur in Englischen. Dissert. Univ. Wien 1954.
9. G. Fant: Acoustic Analysis and Synthesis of Speech with Applications to Swedish. Ericsson Technics 15, 3—108, 1959, 25. o.
10. W. Jassem—B. Piela—M. Steffen: Average spectra of Polish speech. Proceedings of Vibr. Probl. Warsaw No. 2., 59—71, 1959.
11. T. Tarnóczy: Nouvelle méthode pour la détermination du spectre de la parole. Folia Phoniatr. 8, 65—70, 1956. — Détermination of the speech spectrum through measurements of superposed samples. J. Acoust. Soc. Am. 28, 1270—1275, 1956.
12. W. B. Davenport Jr.: An experimental study of speech-wave probability distributions. J. Acoust. Soc. Am. 24, 390—399, 1952.
13. K. E. Kittelsen—C. Poulsen: Statistical distribution analysis Brüel and Kjaer Techn. Review No 1/1964.
14. L. G. Kraft: Correlation Function Analysis. J. Acoust. Soc. Am. 22, 762—764, 1950.
15. D. Middleton: An Introduction to Statistical Communication Theory. McGraw-Hill, New York 1960. 141—145.
16. M. R. Schroeder—B. S. Atal: Generalized short-time power spectra and autocorrelation functions. J. Acoust. Soc. Am. 34, 1679—1683, 1962.
17. D. Middleton: op. cit. 137 o.
18. W. Meyer—Eppler: Die Schwingungsanalyse nach dem Suchton-Verfahren. Arch. d. Elektr. Übertragung 4, 331—338, 1950.
19. W. Meyer—Eppler: Die Spektralanalyse der Sprache. Zs. f. Phonetik 4, 240—252. és 327—364, 1951.

20. *J. L. Flanagan*: Speech Analysis, Synthesis and Perception Springer, Berlin 1965.
21. *D. Middleton*: op. cit. 93 o.
22. *W. Meyer—Eppler*: Grundlagen und Anwendungen der Informationstheorie. Springer, Berlin 1959. 22. o.
23. *J. L. Flanagan*: op. cit. 125. o.
24. *J. L. Flanagan*: op. cit. 136. o.
25. *J. T. Broch—C. G. Wahrman*: RMS recording of narrow band noise with the level recorder type 2305 Brüel and Kjaer Techn. Review No 4/1960. — Effective averaging time of the level recorder type 2305. Brüel and Kjaer Techn. Review No 1/1961.
26. *T. Tarnóczy*: The speech noise and its spectrum. Acta Phys. Hung 7, 87—106, 1957.
27. *D. N. Chorafas*: Statistical Processes and Reliability Engineering. Van Nostrand, Princeton 1960. 178—180. o.
28. *J. A. Aseltine*: Transform Method in Linear System Analysis McGraw-Hill, New York 1958. 231. o.
29. *D. Middleton*: op. cit. 362—366. o.
30. *S. Goldman*: Frequency Analysis, Modulation and Noise McGraw-Hill, New York 1948. 322—324. o.
31. *S. O. Rice*: Mathematical analysis of random noise. Bell. Syst. Techn. J. 23, 282—332 1944, és 24, 46—156, 1945.
32. *S. H. Crandall*: Random Vibration. Mass. Inst. of Technology, Cambridge/Mass. 1958.
33. *T. Tarnóczy*: Die akustische Struktur der stimmlosen Engelaute. Acta Linguist. Hung. 4, 313—349, 1954.
34. *G. Fant*: Modern instruments and methods for acoustic studies of speech. Acta Polytechn. Scandinav. I, 1—81, 1958.
35. *W. Meyer—Eppler*: [22] op. cit. 303 és 398.
36. *Tarnóczy T.*: A beszéd átlagos energia-színképe 6 nyelv alapján. Magyar Fizikai Folyóirat (s. a.)

A DIJON-I TERMÉSZETTUDOMÁNYI KAR DIELEKTRIKUMOK ÉS FERROELEKTROMOS ANYAGOK LABORATÓRIUMÁNAK TEVÉKENYSÉGE*

GENEVIEVE GODEFROY

Laboratoire de Ferroélectriques et Diélectriques, Dijon

A Dijon-i Természettudományi Kar Dielektrikumok és Ferroelektromos Anyagok Laboratóriumának, amely Prof. *Lucien Godefroy* vezetésével a C.N.R.S. támogatásával működik, fő kutatási tevékenysége a ferroelektromossággal és az olyan nagymértékben polarizálható dielektrikumokkal (pl. rutil) kapcsolatos, amelyeknek a vizsgálata megkönnyítheti a ferroelektromosság bizonyos aspektusainak megértését.

Jelenleg a laboratóriumot 4, egyenként kb. 6 kutatóból álló csoport alkotja, a melyek a következő témákon dolgoznak:

A. Ponthibák vizsgálata elektromos mérésekkel — vezető *Mme Geneviève Godefroy*.

B. Ferroelektromos kristályok optikai tulajdonságai — vezető *Etienne Coquet*.

C. Kristályrács dinamika — vezető *Michel Remoissenet*.

D. Dielektromos tulajdonságok — vezető *Lucien Godefroy*.

A. Termoáramok és vezetőképesség mérése, alkalmazás báriumtitanátra és rutilra

A vizsgálatok célja annak tisztázása volt, hogy milyen szerepet játszanak az ionos ponthibák a titán alapú dielektromos kristályok elektromos tulajdonságaiban: a rutiléiban, amely nagymértékben polarizálható, és a báriumtitanátéiban, amely ferroelektromos. Ezért mérték a próbadarabon átfolyó áramot mialatt rövidre zárták azt a polarizálás után és lassan fűtötték egy $b = \frac{dT}{dt}$ (°C/s) konstans fűtési

sebességgel, vagy mialatt folyamatosan feszültség alatt tartották azt állandó hőmérsékleten. Ezen áramokat igen nagymértékben befolyásolja a hibák jelenléte.

I. Mérési technika

1. *Termoáram mérés.* Az 1. ábrán látható a mérőberendezés blokk-sémája, a 2. ábrán egy termikus ciklus leírása, a 3. ábrán a mérőcella részletei, amelyben a próbadarabot rögzítik.

A mérési módszer egy részletét ki kell emelni: A nem ferroelektromos mintákat magas hőmérsékleten helyezik elektromos térbe, majd hirtelen lehűtik őket és rövidre zárva fűtik ki újra. Ferroelektromos mintáknál nem szükséges az elektromos

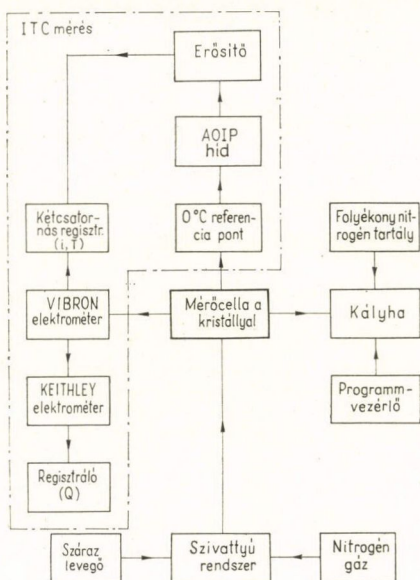
* 1970. nov. 29-én Budapesten tartott előadás.

teret magas hőmérsékleten alkalmazni, megfelelő alacsonyabb hőmérséklet a domének orientálására.

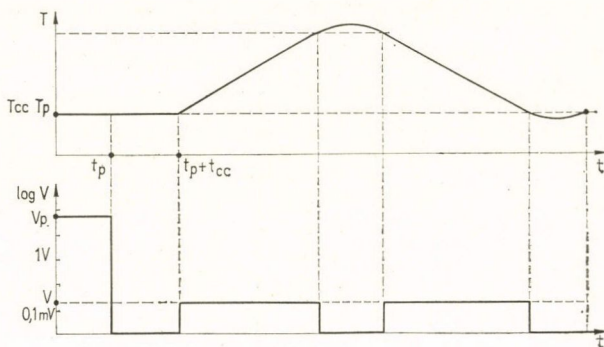
2. *Vezetőképesség mérések.* A mérési technika klasszikus: a mérési elv a 4. ábrán, a kísérleti részletek az 5. ábrán láthatók.

II. Kísérleti eredmények rutilon

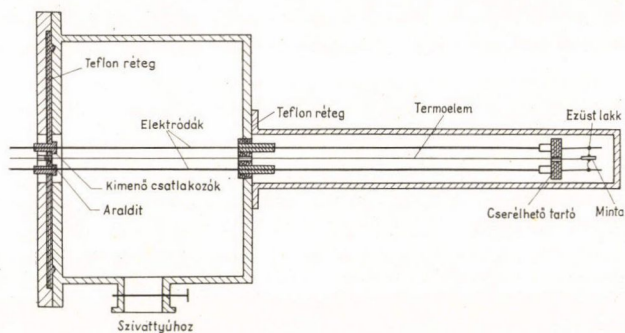
1. *Termoáramok.* A 6. ábrán két helyi maximum látható alacsony hőmérsékleten, és egy harmadik, amelynek a helye a polarizáció hőmérsékletétől függ. A paraméterek (a b kifizéti sebesség, a polarizálás hőmérséklete (T_p) és időtartama (t_p)) változtatásával kimutatható, hogy a két első csúcs jól követi a dipólus jellegű hibákra érvényes törvényszerűségeket, míg a harmadik egyáltalán nem. A 7. ábra össze-



1. ábra. A berendezés blokk sémája



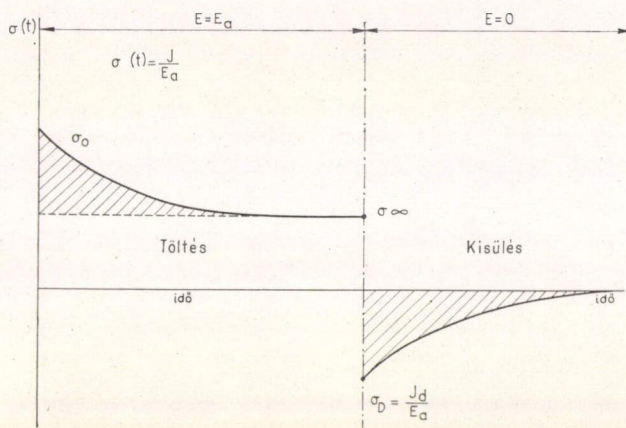
2. ábra. Egy termikus ciklus



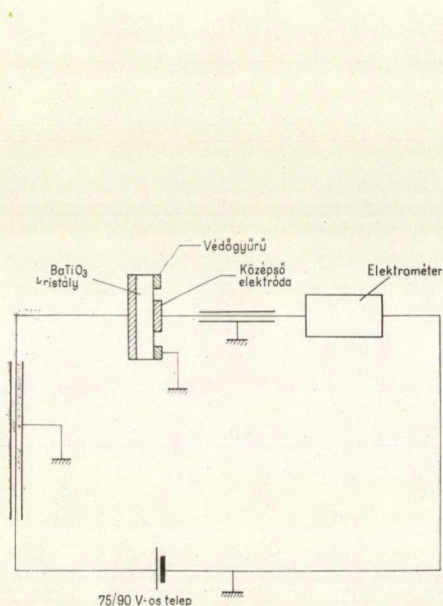
3. ábra. A mérőcella és a próbadarab rögzítésének vázlata

foglalja az ITC formalizmust egy dipólus eredetű csúcsra: kimutatható, hogy a csúcs alakjából és helyéből meghatározható a dipólus $\tau = \tau_0 \exp\left(-\frac{W}{kT}\right)$ relaxációs ideje.

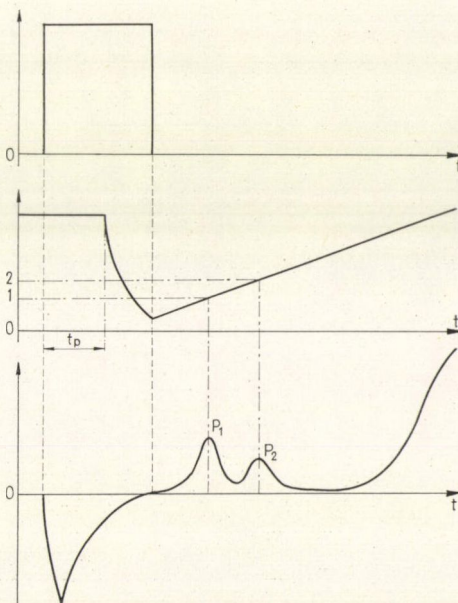
A 8. ábra megadja W és τ_0 értékeit a két alacsony hőmérsékletű csúcsra. Ezen értékek nagyságrendben jól megfelelnek egy ionos természetű dipólusnak. A legegyszerűbb értelmezés, ha feltételezzük, hogy a Ti^{4+} -t egy divalens atom helyettesíti; ennek kompenzálására egy oxigén vakancia keletkezik és a 9. ábrán feltüntetett hat pozíció



4. ábra. Töltés és kisülés mérési elve



5. ábra. Berendezés vezetőképesség mérésre



6. ábra. Termoáram spektrumok

ITC formalizmus

$$b = \frac{dT}{dt}$$

$$\frac{dP}{dt} = -\frac{P}{\tau(T)}$$

$$j(T) = -\frac{dP}{dt}$$

$$\frac{dj(T)}{dT} = 0$$

$$j'(T) = j(T) \frac{P_m}{P_o}$$

$$\log j'(T) = C - \frac{W}{kT}$$

$$\tau = \tau_0 \exp \frac{W}{kT}$$

↑

$$bW\tau_{(T_m)} = KT_m^2$$

↑

W

7. ábra.

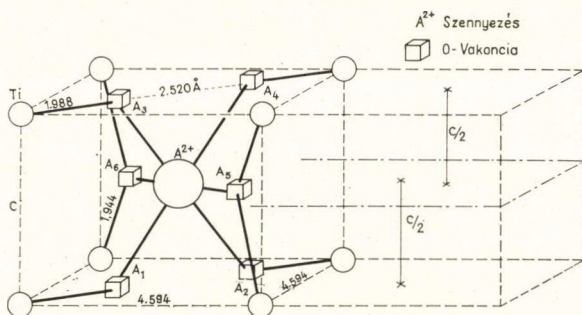
ITC eredmények (TiO_2)

$$P_1 \begin{cases} W_1 = 0,13 \text{ eV} \\ T_{m1} = 113^\circ \text{K} \\ \tau_{o1} = 10^{-4} \text{ s} \end{cases}$$

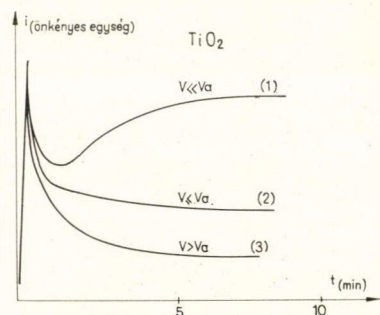
$$P_2 \begin{cases} W_2 = 0,24 \text{ eV} \\ T_{m2} = 136^\circ \text{K} \\ \tau_{o2} = 2 \cdot 10^{-8} \text{ s} \end{cases}$$

$$P_m \Rightarrow T_m \simeq T_p$$

8. ábra. A két ITC csúshoz tartozó energiaértékek



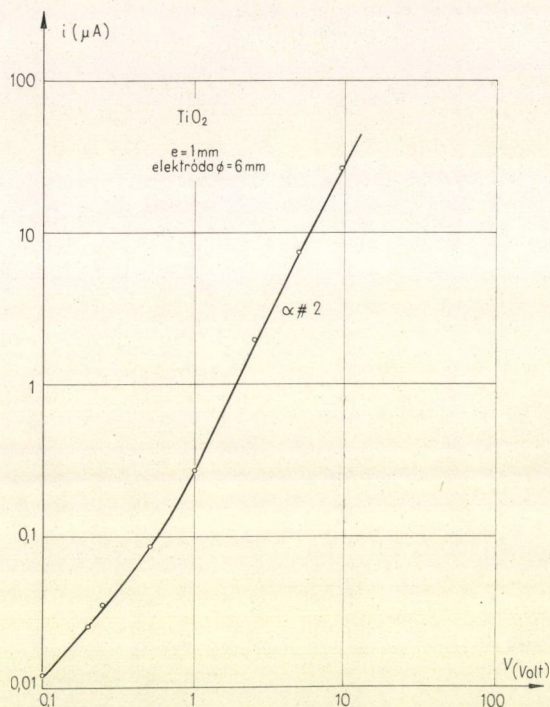
9. ábra. Rutil kristály vázlata hiányhellyel



10. ábra. Az áram változása a feszültség időtartamának függvényében

valamelyikét elfoglalhatja. Az elektromos térben fellépő eredő elektromos momentum kinetikájára végzett részletes számítások szerint 3 dipólus jellegű csúcshoz kellene jelentkezni a vakancia számára lehetséges 3 ugrásnak megfelelően: így tehát egy ugrás gyakorlatilag tiltott.

2. *Vezetőképesség.* A 10. ábrán feltüntetett eredményekből látható, hogy az áram függ a feszültség alkalmazásának időtartamától. Nagy feszültségeknél az



11. ábra. $i=f(V)$ karakterisztika

áram erősen nő és átütést okozhat; kis feszültségeknél az áram egy határértéken stabilizálódik. Ebben az esetben vizsgálható ennek a határ-áramnak a változása a feszültséggel: a 11. ábrán látható, hogy az Ohm-törvény nem teljesül. A 12. ábrán láthatjuk, hogyan változik az aktivációs energia a hőmérséklettel: a vezetőképesség nem egyszerűen ionos (Lidiard elmélet), nem is egyszerűen elektron vezetés (félvezetők elmélete); az érintkezések fontos szerepet játszanak, de nem viselkednek egyszerű töltés injektáló kontaktusokként (Lampert elmélet). Megvizsgálták, mennyiben lehet az áram egy injektált áram, amelyet a jelenlevő ionos tértöltés módosít.

III. Eredmények báriumtitanátra

1. *A báriumtitanát leírása.* A 13. ábra a báriumtitanát kristályszerkezetét mutatja közönséges hőmérsékleten: tetragonális szerkezet és a ferroelektromos polarizáció c tengely irányú.

A titanát köbös szerkezetű $T > 120^\circ \text{C}$ esetén

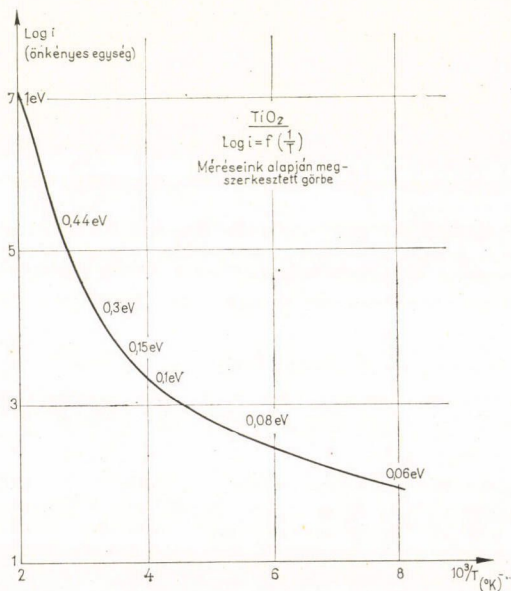
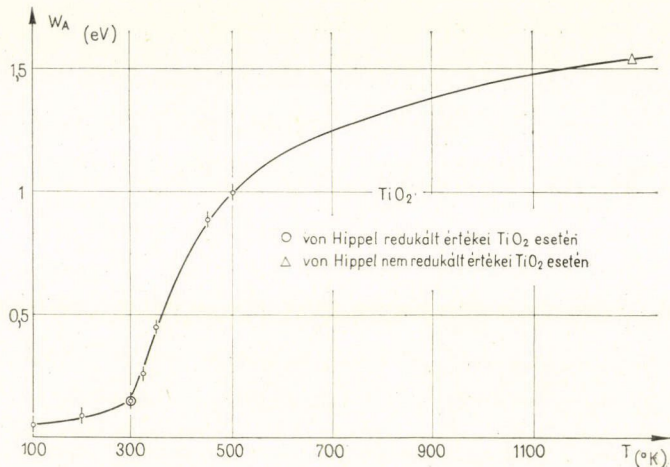
A titanát tetragonális szerkezetű $0^\circ \text{C} < T < 120^\circ \text{C}$ esetén

A titanát ortorombos szerkezetű $-70^\circ \text{C} < T < 10^\circ \text{C}$ esetén

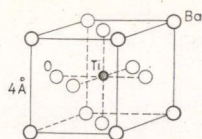
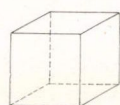
A titanát romboéderes szerkezetű $T < -70^\circ \text{C}$ esetén.

A 14. és 15. ábrákon látható egy kristály polidoménos struktúrája a tetragonális fázisban.

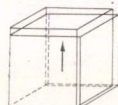
A 16. ábra a ferroelektromos polarizáció hőmérséklettel való változásának elméleti görbét ábrázolja és a részben hidroxidallal szennyezett (OH^- oxigén helyeken) felületi rétegek hatását az eredő polarizációra.



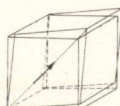
12. ábra

A BaTiO_3 köbös rácsa

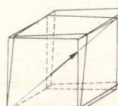
Köbös rács



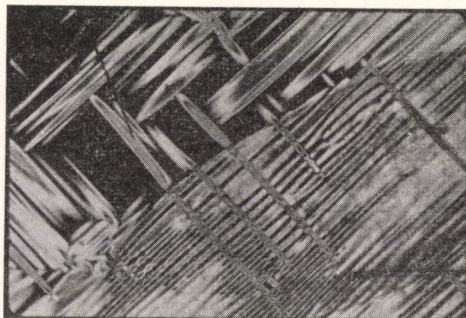
Tetragonális rács



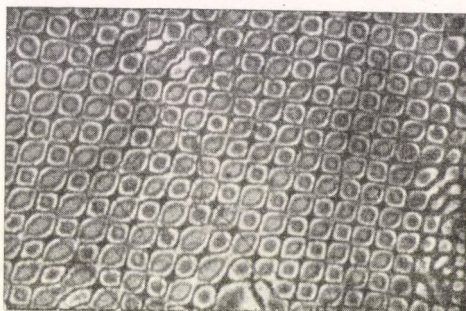
Orthorombos rács



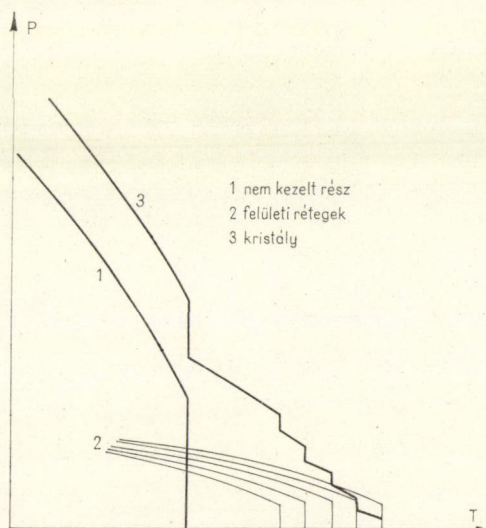
Romboéderecs

13. ábra. BaTiO_3 szerkezete

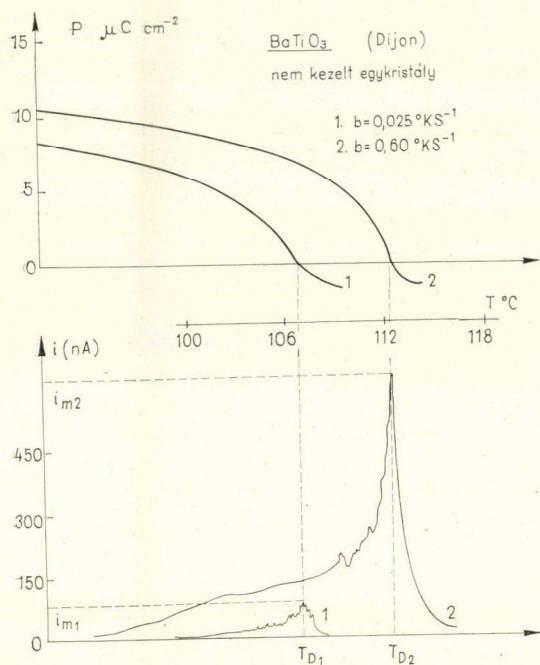
14. ábra. Polidomén struktúra



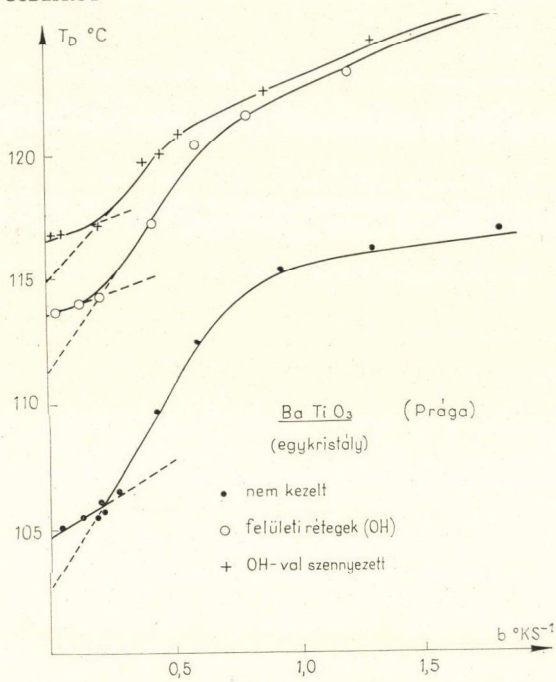
15. ábra. Sakktabla struktúra



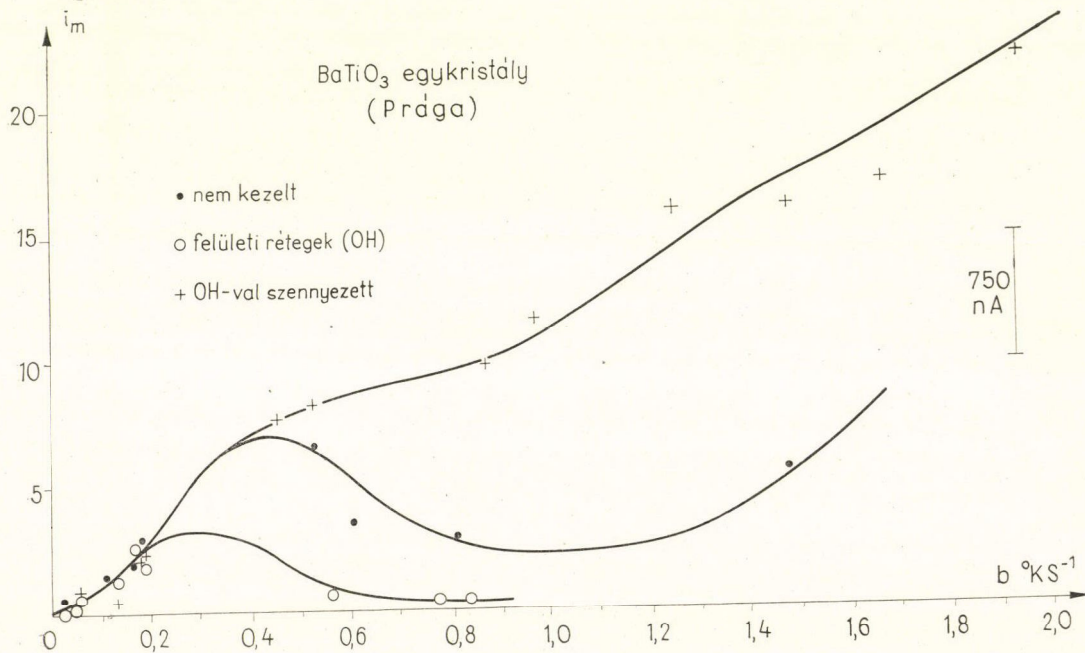
16. ábra. Elméleti polarizálódás és a felületi rétegek hatása



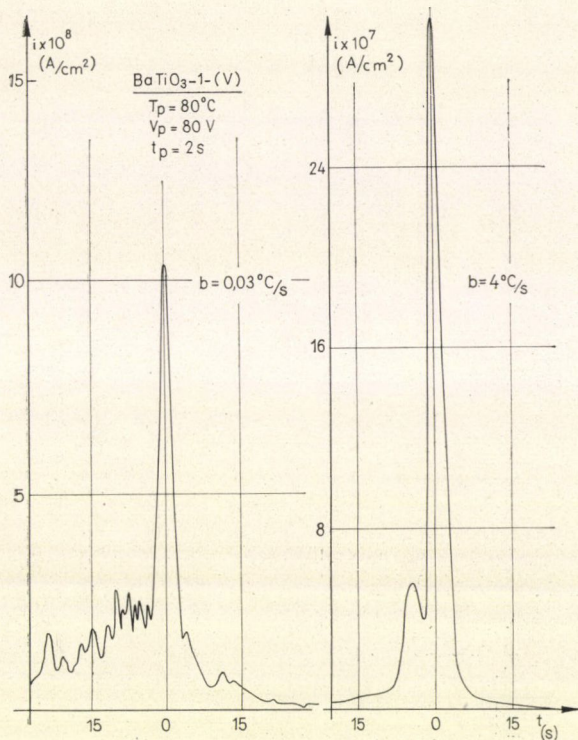
17. ábra. Polarizálódás és termoáram spektrumok két különböző b érték esetén



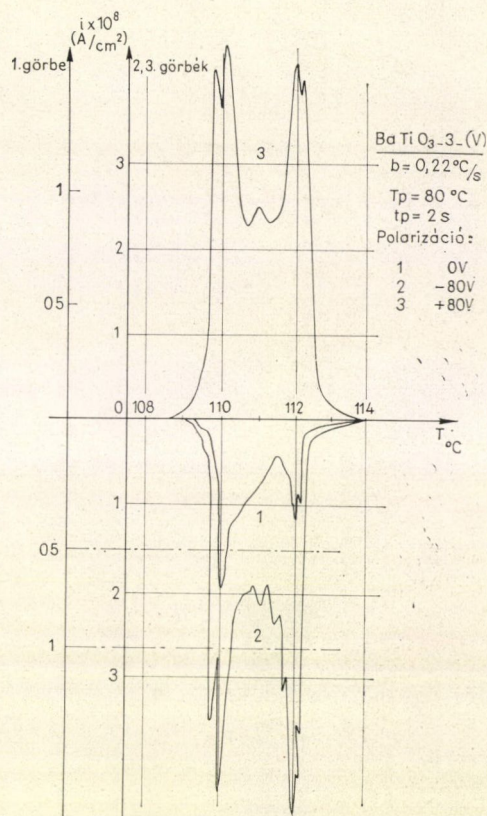
18. ábra. b hatása T_m -re



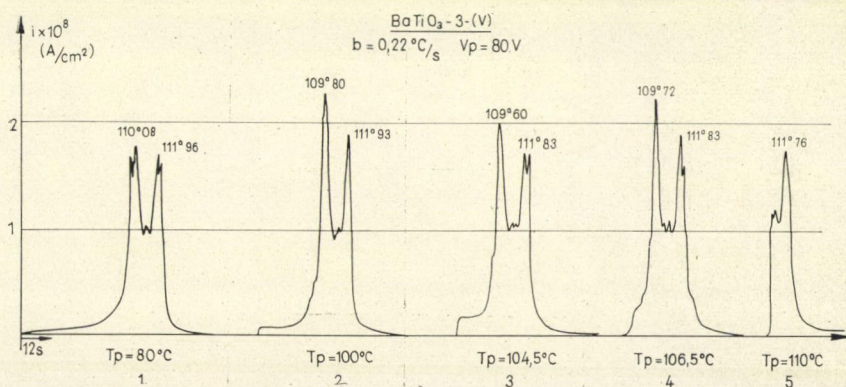
19. ábra. b hatása I_m -re



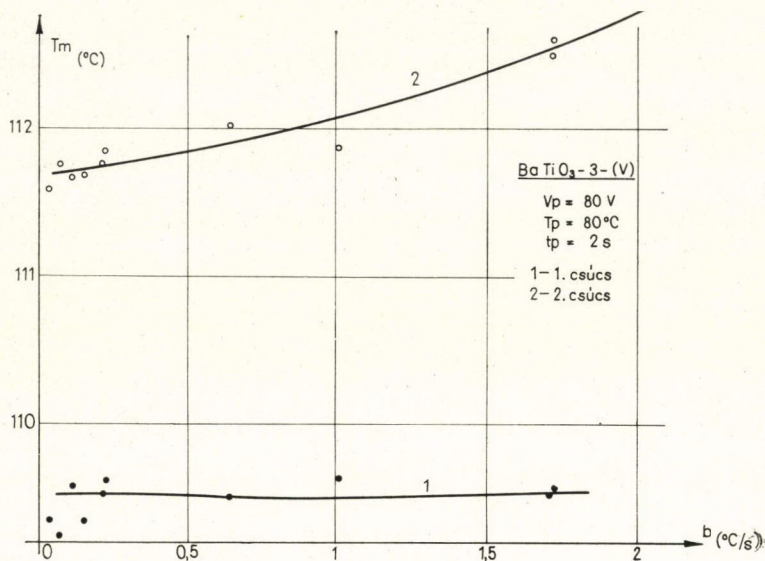
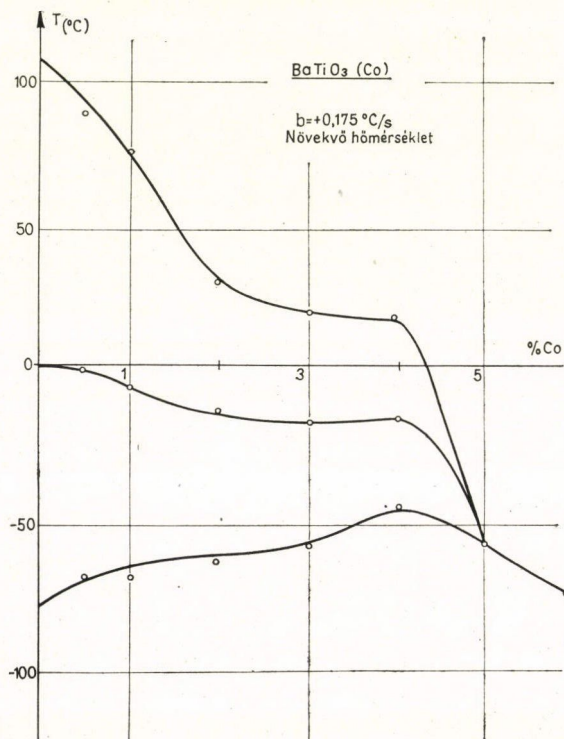
20. ábra. Termoáram spektrumok különböző kifizési sebességek esetén



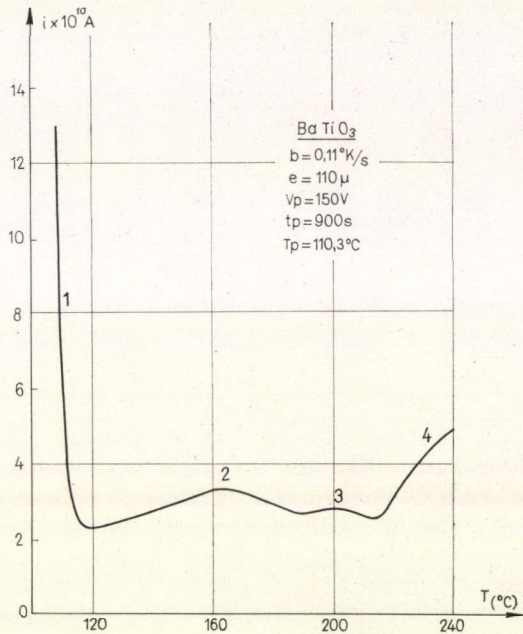
21. ábra. A polarizálás irányának hatása két-maximumos kristály esetén



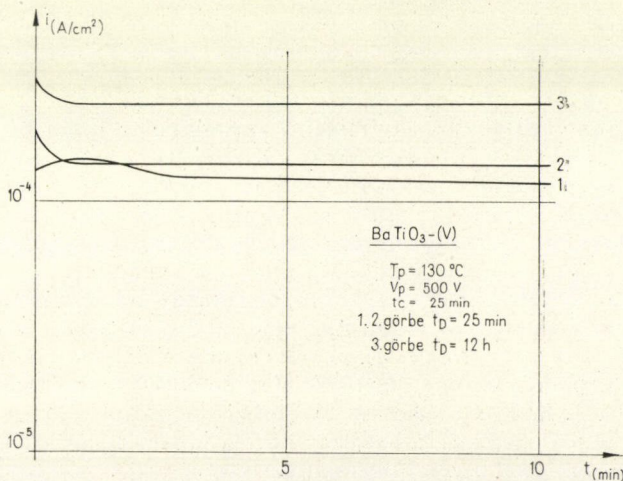
22. ábra. A polarizálás hőmérsékletének hatása

23. ábra. b hatása T_m -re a két csúcs esetén24. ábra. Kobalt szennyezés hatása T_m -re három átalakulás esetén

2. *Termoáramok mérése.* A 17. ábrán ugyanazon kristály két különböző sebességgel (b) történt kifűtésekor kapott töltés és áram értéke látható: a piroelektromos áramnak egy I_m maximuma van, amely annál nagyobb és annál magasabb T_m hőmérsékleten lép fel, minél nagyobb b értéke. A 18. és 19. ábrákon látható, hogyan hat b értéke T_m -re és I_m -re és egyidejűleg az is, milyen szerepet játszanak az olyan rác-



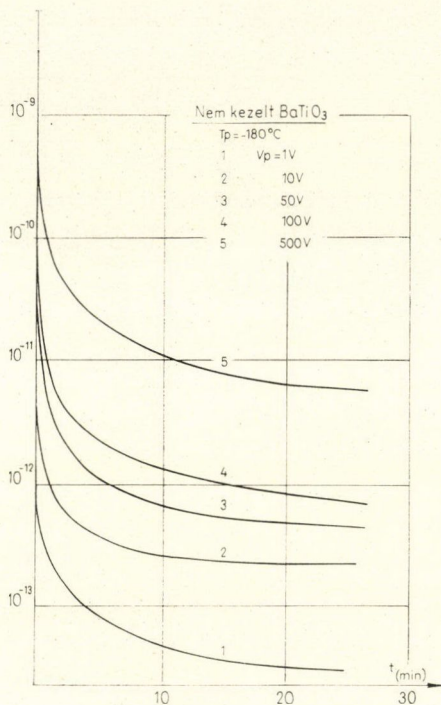
25. ábra. Termoáram a piroelektromos fázisban



26. ábra. Áram nem kezelt BaTiO₃ kristály esetén (töltés 130°C-on)

hibák mint például az OH^- , akár felületi rétegben, akár a kristály belsejében történt szennyezés után.

A 20. ábra a termoáramok spektrumát ábrázolja igen kis kífűtési sebességnél; látható a finomsztruktúra megjelenése az átalakulásnál: ez a jelenség a domének



27. ábra. Áram, töltés -180°C -on

átorientálódásából származik és egyetlen domént tartalmazó kristályoknál nem lép fel; $0,2^\circ\text{C/s}$ -nál nagyobb sebességeknél már teljesen eltűnik.

A báriumtitanát kristályok nagy részénél az átalakulás során két csúcs észlelhető, amelyek általában igen különböznek. Kiválasztva egy kristályt, amelynél a két csúcs majdnem egyenlő magas volt, tanulmányozták a kífűtés előtti polarizáció irányának (21. ábra), a polarizáció hőmérsékletének (22. ábra) és a kífűtési sebességnek a hatását a két maximum hőmérsékletére (23. ábra).

Kimutatták, hogy a hidroxil ionokkal szemben a kobalt szennyezés (Co^{3+} Ti^{4+} helyen) lecsökkenti a tetragonális \rightleftharpoons köbös átalakulás hőmérsékletét és a másik két átalakulás hőmérsékletét úgy módosítja, hogy ha 5%-nál több kobalt van a kristályosító kádban, csak egy ferroelektromos átalakulás észlelhető (24. ábra).

A 25. ábra a paraelektromos fázisban történő kífűtésekor kapott két dipólus csúcst mutatja: a 2. és 3. csúcsokat az oxigén vakanciákkal való szennyezés megnöveli, tehát a csúcsok szemmel láthatólag ehhez a hibához kapcsolódnak.

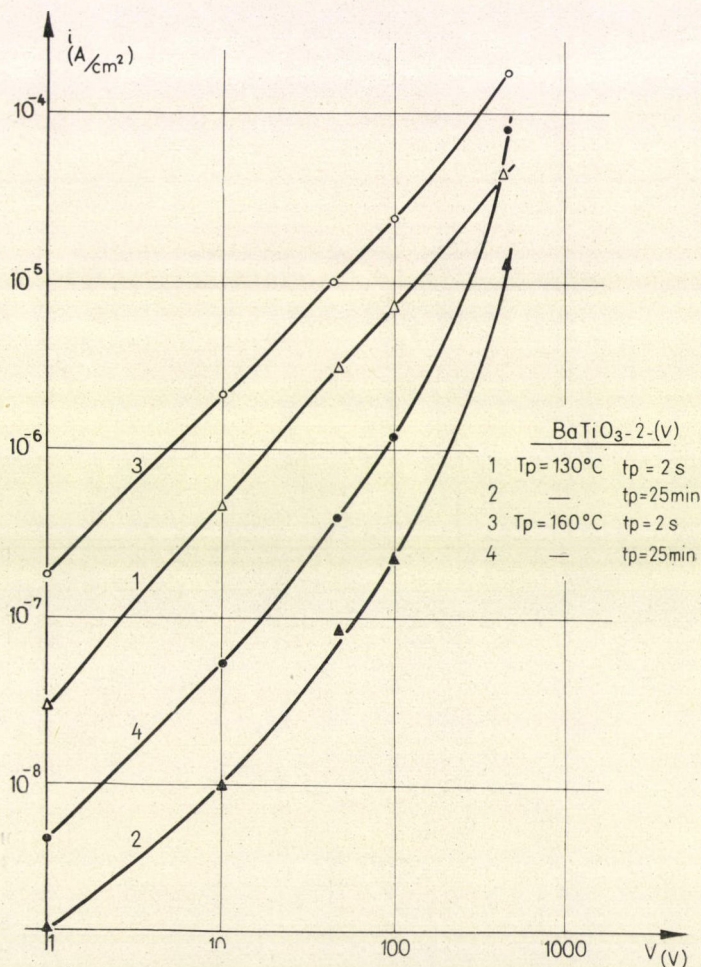
Ezen eredmények értelmezése folyamatban van és a ferroelektromos rács által polarizált hibáktól származó anharmonikus rezgések segítségével történik.

3. *Vezetőkéesség mérések.* A 26. ábra az áramerősség változását mutatja az alkalmazott feszültség időtartamának függvényében az első 10 percben. Az is látható, hogyan változik az áram egy 25 perc után bekövetkező kisütés után, majd egy 12 óra múlva történő második kisütés után: a határ-áram növekszik. A 27. ábra mutatja, hogy -180°C -on a határ-áram stabilizálódik a második feltöltés után.

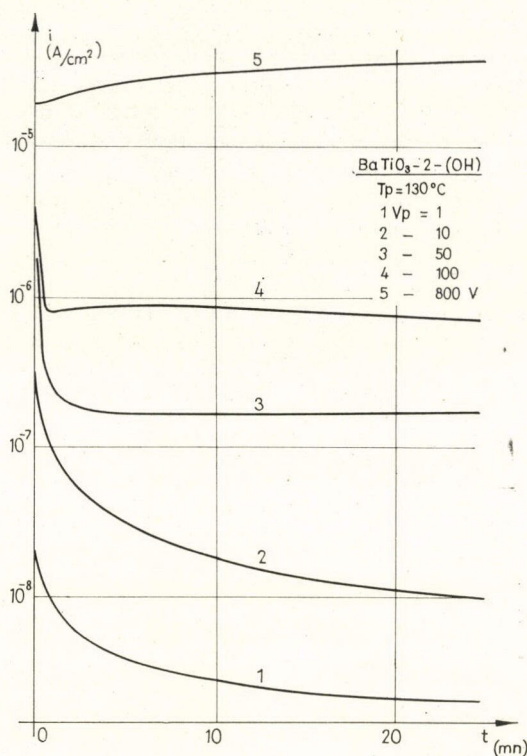
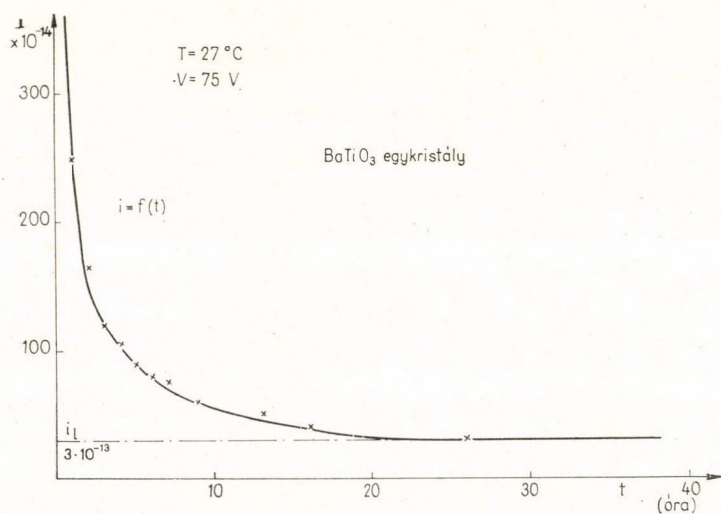
A 28. ábrán látható, hogy az i_0 kezdeti áram követi az Ohm törvényt de ez már nem mondható el az áramról 25 perc múlva.

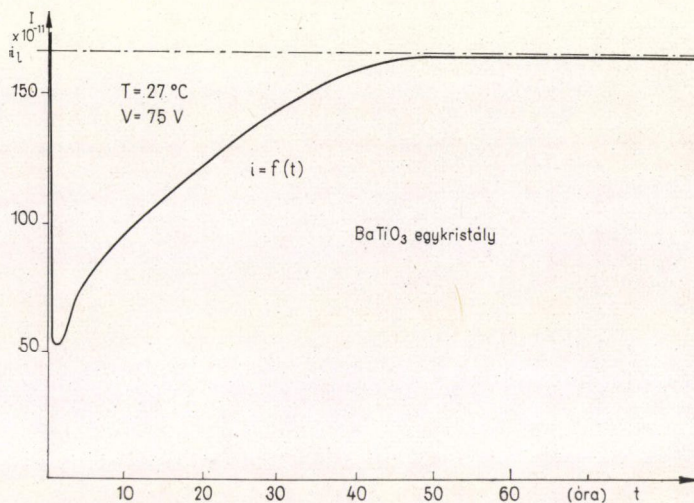
A 29. ábra egyidejűleg mutatja a feszültség és ezen feszültség alkalmazása időtartamának hatását 130°C -on OH-val szennyezett kristályokban, a próbadarabot az egyes mérések között hosszú ideig rövidre zárva.

A következő — 30. és 31. ábrákon látható — eredmények „előregedett” kristályokra vonatkoznak, amelyeket sokszor feszültség alá kell helyezni és kisütni mielőtt

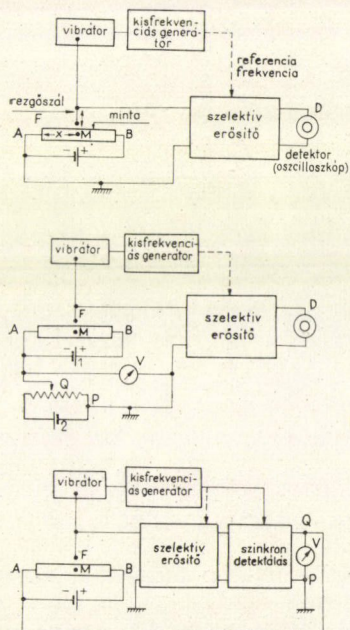


28. ábra. $i_0 = f(V)$ és $i = f(V)$ 130 és 160°C -on

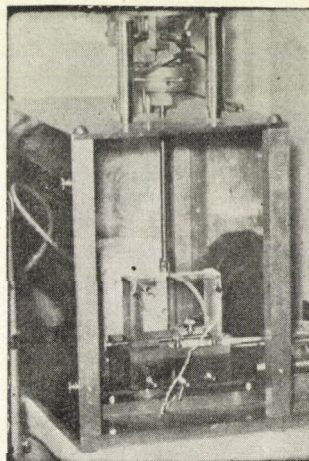
29. ábra. Töltődési áram OH-val szennyezett $BaTiO_3$ esetén30. ábra. Vezetőképesség eredmények: $i = f(t)$, nem kezelt kristály



31. ábra. Más $i = f(t)$ eredmény azután,
hogyan a kristályt több termikus ciklusnak vetették alá



32. ábra. Általános
kísérleti elrendezés



33. ábra. A rezgő szálak
berendezés

Redukált változók

$$\omega = \frac{qV}{kT} \quad \eta = \frac{E}{E_0} \quad \xi = \frac{x}{L_D} \quad \tau = \frac{t}{t_r}$$

$$L_D = \frac{1}{\alpha} = \left[\frac{kT\epsilon\epsilon_0}{2Nq^2} \right]^{\frac{1}{2}} \quad E_0 = \frac{kT}{qL_D}$$

$$t_r = \frac{1}{\gamma} = \frac{2q}{\alpha^2 k T \mu} = \frac{\epsilon\epsilon_0}{\sigma}$$

Törvények

$$2 \frac{\partial \eta}{\partial \xi} = \frac{p}{N} - 1 \quad \frac{2}{\alpha \mu k T} \frac{\partial j}{\partial \xi} = - \frac{\partial p}{\partial \tau}$$

$$\frac{j}{\alpha \mu k T} = p \eta - \frac{\partial p}{\partial \xi} \quad \eta = - \frac{\partial \omega}{\partial \xi}$$

Határfeltételek

$$\omega(\alpha L, \tau) - \omega(0, \tau) = \Omega \quad j_1 = j_2$$

$$\int_0^{\alpha L} p d\xi = N\alpha \quad \rightarrow \quad \eta_1 = \eta_2$$

Időtől független megoldás

$$\xi = \int_0^{\omega} \frac{du}{[u + \exp(\omega_i - u) + B]^{\frac{1}{2}}}$$

$$\omega_i = \log \frac{\Omega}{1 - e^{-\Omega}} \quad \alpha L = \int_0^{\Omega} \frac{du}{[u + \exp(\omega_i - u) + B]^{\frac{1}{2}}}$$

34. ábra. Kiindulási egyenletek

egy stabil határ-áram elérhető. Ezen eredmények nem magyarázhatók helyesen a dielektrikumokban fellépő áramokkal és egy olyan elméletet kell konstruálni, amely figyelembe veszi az ionos tértöltés réteg kialakulását a dielektrikumban és a töltéshordozók injektálását az elektródáknál.

Összefoglalva, láthatjuk, hogy a hibák jelenlétének igen fontos szerepe van a tanulmányozott anyagokon keresztülhaladó áramokban mind állandó hőmérsékleten alkalmazott elektromos tér (vezetőképesség), mind polarizáció után rövidre zárt állapotban történő kikapcsolás esetén.

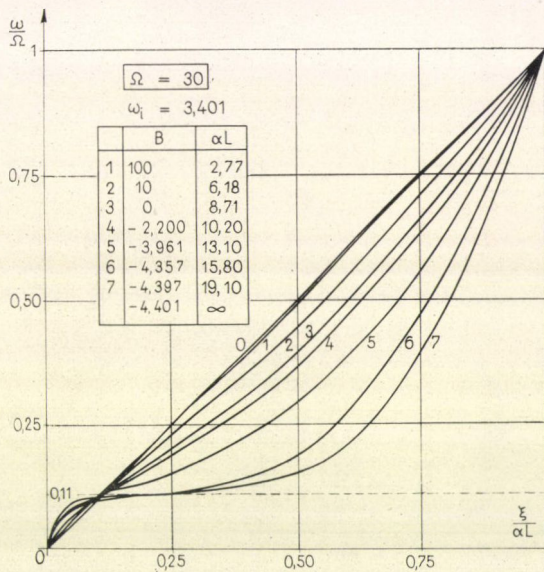
Az eredmények esetleg értelmezhetők feltételezve, hogy az ionos pont hibák elmozdulása módosítja a kristály rácsrezgéseit és az injektáló fém-dielektrikum érintkezést. Ez a munka a kutatócsoportban folyamatban van.

Potenciáeloszlás dielektrikumokban, alkalmazás kerámiákra és BaTiO_3 egykristályokra

E munka célja azon potenciáeloszlások tanulmányozása volt, amelyek akkor jönnek létre egy dielektrikumban, amikor azt két különböző potenciálon levő elektróda közé helyezzük. A kísérleti módszert „rezgő szál módszer”-nek nevezik, és az elméleti vizsgálatok azon a feltevésen alapulnak, hogy a dielektrikumban mozgó töltések (töltött ponthibák) vannak jelen szigetelő elektródák között.

I. Kísérleti módszer

A próbadarab fölött elhelyezett rezgő szál által felvett potenciál attól függ, hogy a próbadarabnak éppen közvetlenül alatta levő pontjai milyen potenciálon vannak.



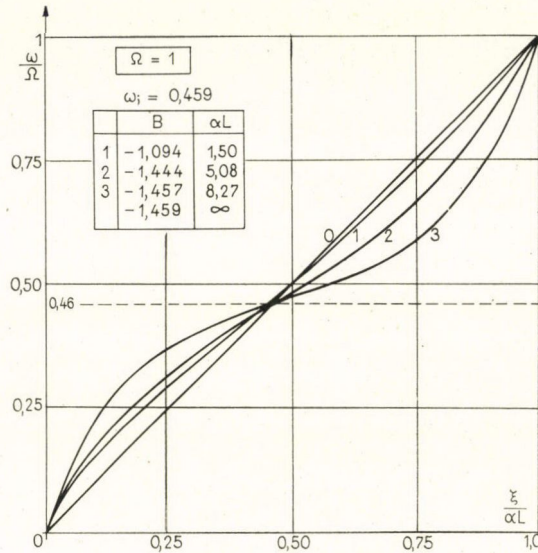
35. ábra. Modell egy töltéshordozóval, $\Omega = 30$

Egy megfelelő null módszeres elektronikus elrendezés segítségével a 32. ábrán látható módon regisztrálható ez a potenciál. A próbadarab lassan, egyenletesen mozog a szál alatt (33. ábra) oly módon, hogy a regisztrálón közvetlenül megkapható a $V(x)$ potenciál változása a próbadarab pontjának a próbadarabon elhelyezett elektródától való x távolsága függvényében. Ezen potenciálok alakulása egy folytonosan alkalmazott feszültség időtartamának függvényében szintén megfigyelhető.

II. Elméleti megfontolások

A 34. ábra összefoglalja annak a modellnek a kiindulási egyenleteit, amelyben egyetlen típusú mozgó töltés van; a dielektrikumot egy végtelen kiterjedésű közegnek tekintve, amelyet csak két végtelen planparallel elektróda határol, a problémát

egy dimenzióra redukálja. Egyensúlyi helyzetben tér nélkül a pozitív töltéshordozók sűrűsége legyen N . Felírjuk redukált változókkal a Poisson-egyenletet, az áramsűrűséget, a töltés megmaradás törvényét és a térerősség és potenciál közötti összefüggést. Határfeltételek: egy előírt potenciálesés, a próbadarab semlegessége, a szigetelő érintkezések. Ilyen körülmények között egy integrállal fejezhető ki a potenciál, amely két paramétertől függ egy adott hőmérsékleten: az $L_D = \frac{1}{\alpha}$ Debye hosszúság-hoz tartozó N koncentrációtól és az alkalmazott $V_2 - V_1 = \frac{kT}{q}$ potenciálkülönbségtől.



36. ábra. Modell egy töltéshordozóval, $\Omega = 1$

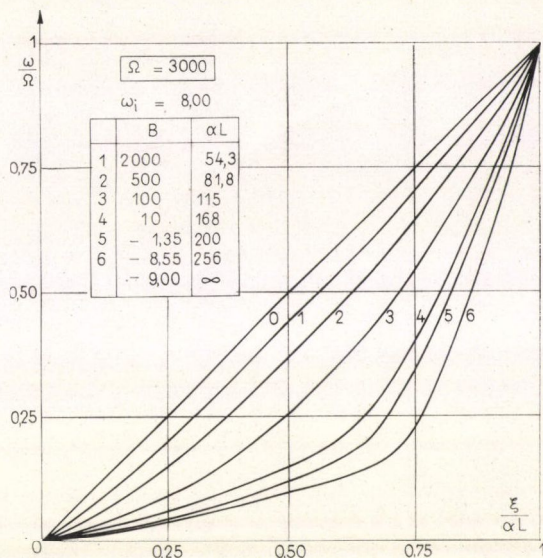
A számításokat elvégezve nyomon követhetők a potenciáeloszlási görbék, amint a 35., 36., 37. ábrákon láthatók. A mozgékony pozitív töltéshordozók felhalmozódási tartománya annál keskenyebb, minél nagyobb Ω értéke, a potenciáeloszlási görbék görbülete annál kifejezettebb, minél nagyobb a töltéshordozók koncentrációja. A 38. ábrából látható, hogy adott koncentráció esetén a görbület kifejezettebb kis potenciálkülönbségeknél.

Hasonló módon tárgyalható két különböző előjelű töltéshordozó esete: az eloszlás szimmetrikus szigetelő elektródák esetén és aszimmetrikus, ha az elektródák egyike félig szigetelő (39. ábra). A töltés koncentráció hatása a 40. ábrán látható. A 41. ábra mutatja, hogyan interpolálhatók a kísérleti görbék az elméletiek közé, megkapva így α -t és evvel N -t.

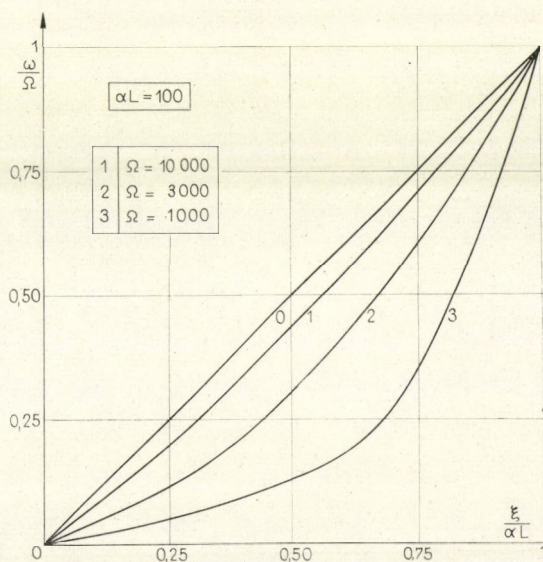
N ismerete lehetővé teszi a hibák W_F képződési energiájának kiszámítását a mérés folyamán, amikor is azok termikus egyensúlyban vannak. A potenciál alakulását, különösen a minimum csökkenését vizsgálva látható, hogy az a következő formájú törvényt követi:

$$\log \frac{V_{\min}}{V_0} = -\gamma t.$$

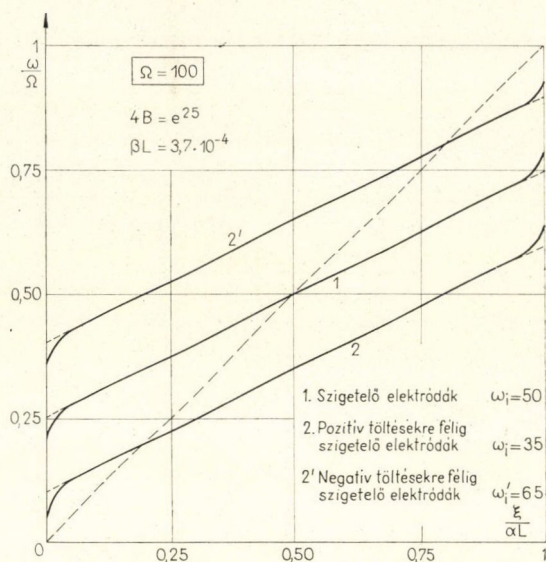
γ meghatározásával megkapható a töltéshordozók mozgékonyasága és abból az elmozdulásukhoz szükséges W_D energia. Ezen összefüggések a 42. ábrán vannak összegyűjtve.



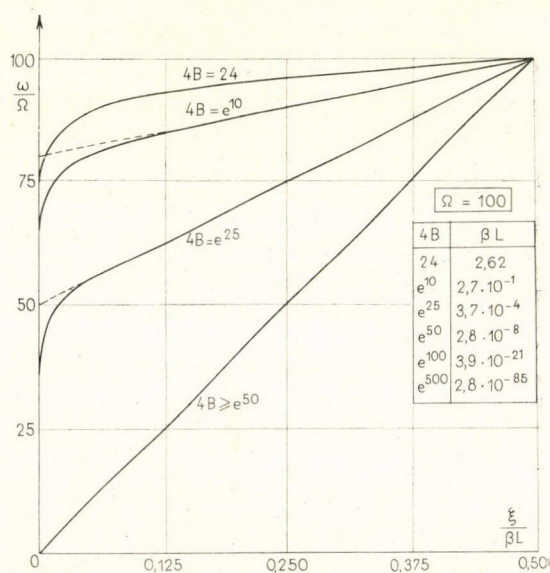
37. ábra. Modell egy töltéshordozóval, $\Omega = 3000$



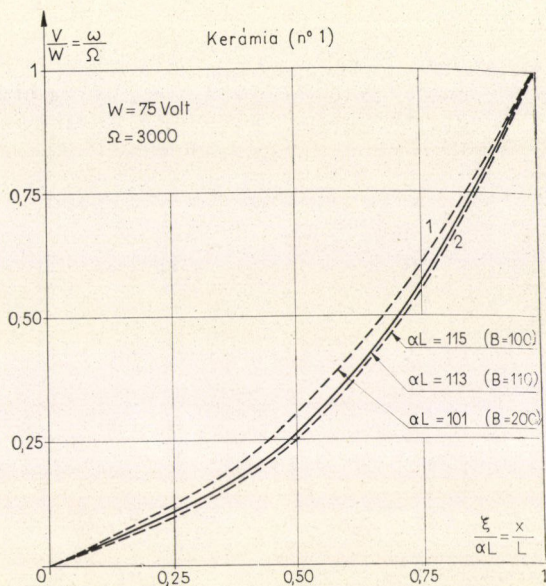
38. ábra. α hatása adott Ω esetén



39. ábra. Modell két töltéshordozóval:
az elektródák természetének hatása



40. ábra. Modell két töltéshordozóval:
a töltések koncentrációjának hatása



41. ábra. Kísérleti eredmények kifejtése

Képződési energia

$$\alpha = \left[\frac{2 N q^2}{k T \epsilon \epsilon_0} \right]^{\frac{1}{2}} \quad \rightarrow \quad N = \frac{\alpha^2 k T \epsilon \epsilon_0}{2 q^2}$$

$$N = N_0 \exp - \frac{W_F}{kT} \quad \rightarrow \quad W_F = kT \log \frac{N_0}{N}$$

Mozgási energia

$$\log \frac{V_{\min}}{V} = -\gamma^t \quad \gamma = \frac{\alpha^2 \cdot k T \mu}{2 q}$$

$$\mu = \frac{q D}{k T} \quad D = g a^2 P$$

$$P = g' \frac{k T}{h} \exp - \frac{W_D}{k T} \quad g g' = 1$$

$$\rightarrow W_D = k T \log \frac{g a^2}{\mu h}$$

a = a köbös elemi cella élhossza

42. ábra. Képződési és mozgási energiák számítása

III. Első eredmények BaTiO₃ kerámiákon

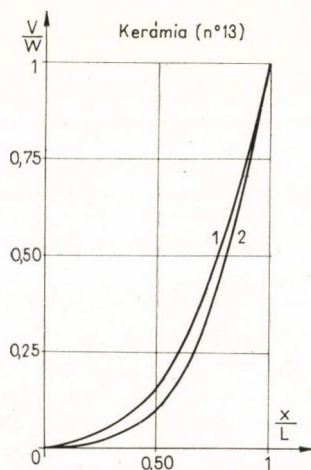
Az eredmények nagymértékben függenek a próbadarabtól. Bizonyos minták eleget tesznek a modell alapján kapott összefüggéseknek egyetlen negatív töltéshordozó esetén. A 43. ábrán látható a potenciáeloszlás kialakulása és az egyensúlyi helyzet beállása. A 44. ábra mutatja a potenciáeloszlásokat abban az esetben, amikor a feszültséget fokozatosan csökkentik anélkül, hogy megvárnák egy újabb egyensúlyi helyzet beállását. A 45. ábrán látható a potenciál csökkenése rövidzárlétesítése után. A 46. ábra mutatja a $\log V_{\min}$ által követett lineáris összefüggést.

Az ilyen típusú próbadarabokra a számítás a következő értékeket adja:

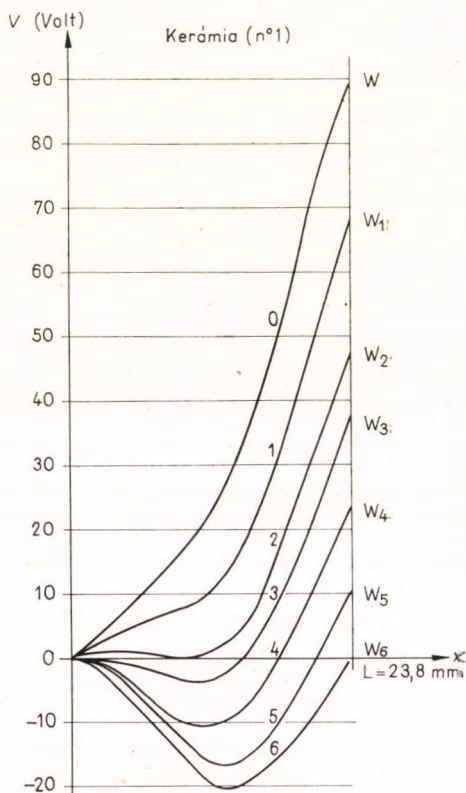
$$W_F = 0,7 \text{ eV} \quad W_D = 0,3 \text{ eV}$$

és a szerzők szerint a mozgékony pozitív ionok a rögzített Ti³⁺ ionok által kompenzált oxigén hiányhelyek.

A többi próbadaraboknál két szimmetrikus (47. ábra) vagy aszimmetrikus (48. ábra) görbe látható, amely jellemzi a két mozgékony töltéshordozó jelenlétét.



43. ábra. Parabolikus potenciáloszlás BaTiO₃ kerámián 90 V feszültségnél



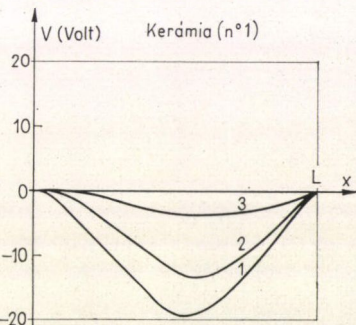
44. ábra. Potenciáeloszlások csökkenő feszültségeknél

IV. Eredmények $\text{Ba}_x\text{Sr}_{1-x}\text{TiO}_3$ típusú kerámiákon

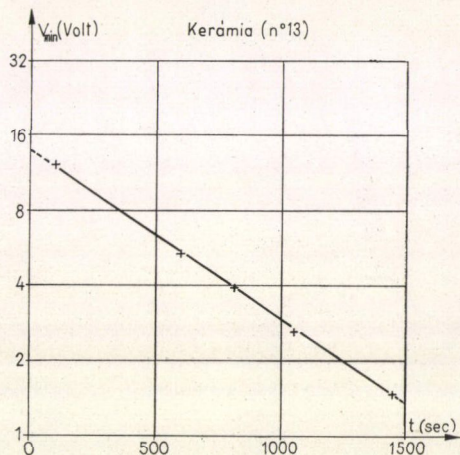
A megfigyelt potenciáeloszlások sokkal inkább függenek a kerámia előállításakor alkalmazott eljárásoktól (szinterelés hőmérséklete), mint a kerámia összetételétől.

Eredményül parabolikus jellegű görbéket kaptak, mint például a III. sorozat 6. $\text{Ba}_{0,12}\text{Sr}_{0,88}\text{TiO}_3$ összetételű próbadarabján, a már megfigyelthez hasonló alakulással (49., 50., 51. ábra).

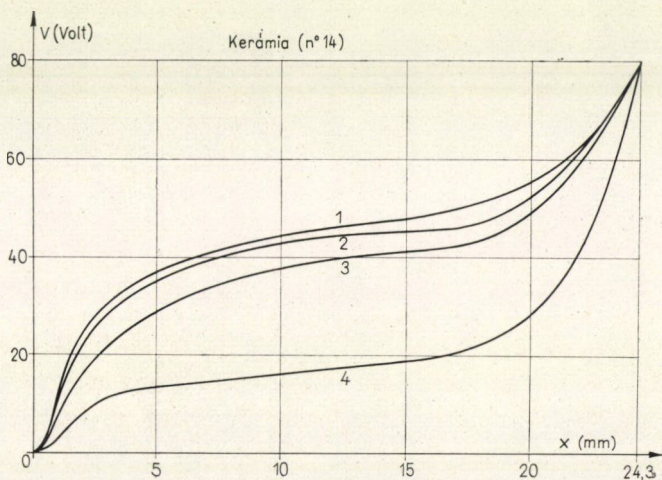
Egyes kristálpéldányokon olyan erős görbületet tapasztaltak, hogy azok nem magyarázhatók kizárólag egy tértöltéses mechanizmus segítségével (pl. az 52. ábrán a II. sorozat 4. $\text{Ba}_{0,8}\text{Sr}_{0,2}\text{TiO}_3$ mintája). Az 53. és 54. ábrákon a potenciáeloszlás,



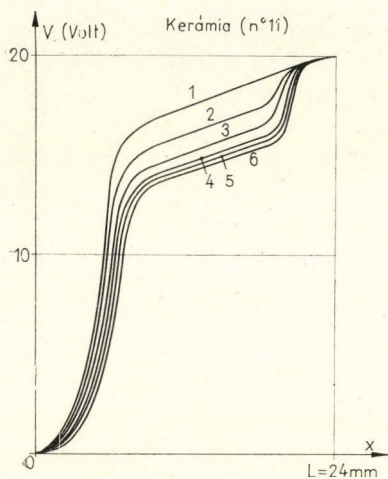
45. ábra. Potenciáeloszlás kialakulása a próbadarab rövidre zárása után



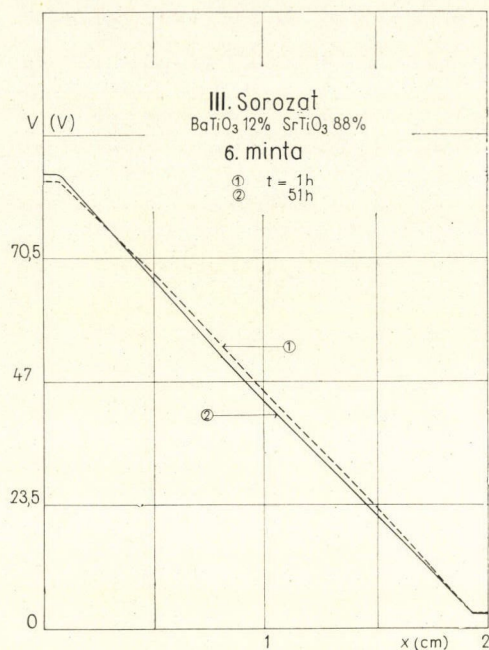
46. ábra. $\log V_{\min} = f(t)$ görbe



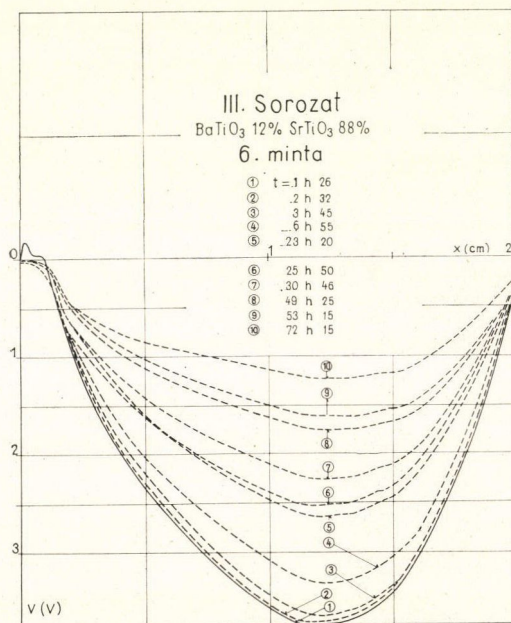
47. ábra. BaTiO_3 kerámiák két szimmetrikus görbülettel



48. ábra. BaTiO₃ kerámiák két aszimmetrikus görbülettel

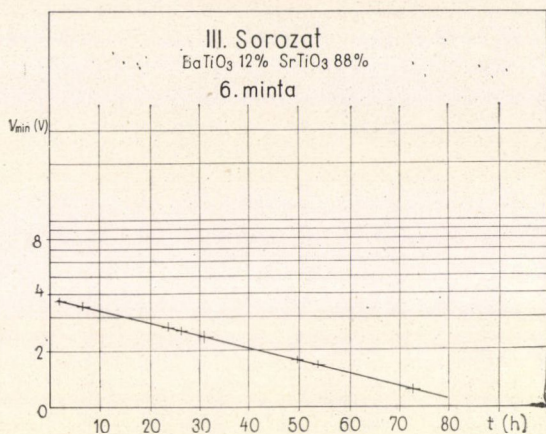


49. ábra. III. sorozat, 6. minta

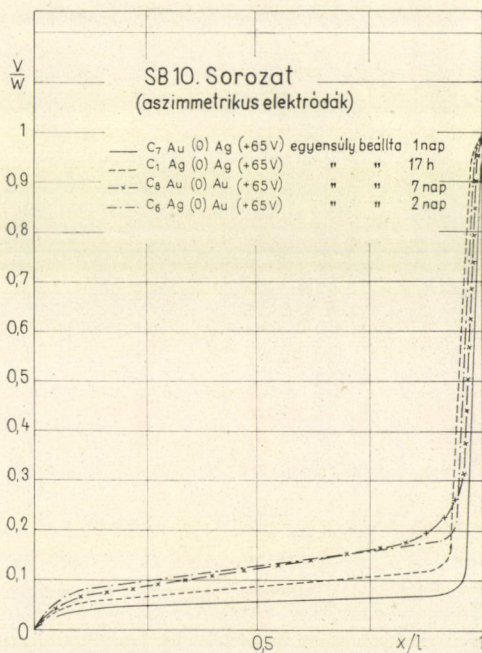


50. ábra. III. sorozat, 6. minta: potenciál kialakulás rövidzárkor

majd az egyensúlyi helyzet rövidzáráskor való visszaállása látható különböző azonos összetételű kerámia mintákon. Látható, hogy a sorozatok nagyon heterogének lehetnek, és hogy a mozgékony töltéshordozók előjele kerámiánként változhat. Az 55. ábra csoportosítja az első gyártási széria különböző összetételű kerámiáin kapott eredményeket: a potenciáeloszlások jellegéből következtetni lehet az oxigén



51. ábra. III. sorozat, 6. minta: $V_{\min}=f(T)$ görbe



52. ábra. Minta az SB sorozatból: igen nagy görbület

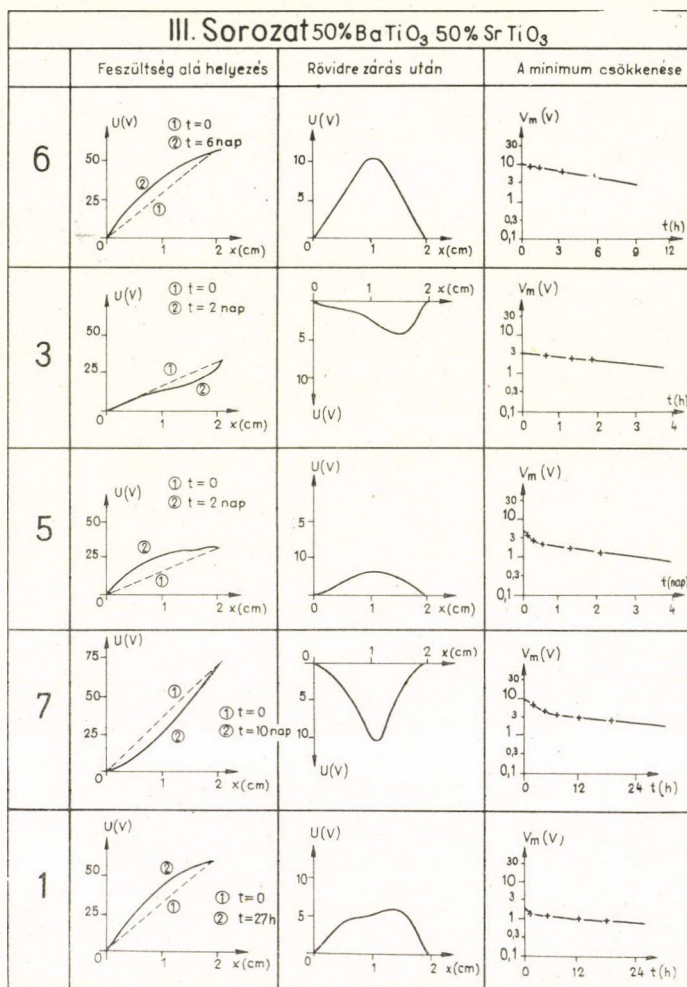
vakanciák képződési és mozgási energiájára. Az 56. ábrán látható, hogy az oxigén vakancia mozgási energiája független a kerámia összetételétől, és hogy a képződési energiának a $\text{Ba}_{0,25}\text{Sr}_{0,75}\text{TiO}_3$ összetételnél maximuma van.

A kerámia előállítása döntő szerepet játszik: az 57. ábra mutatja, milyen mértékben változhatnak az eredmények kristálpéldányonként.

V. A technika tökéletesítése

Azt gondolták, hogy a rezgő szál módszer tökéletesíthető, ha vákuumot alkalmaznak a célból, hogy azután a mérés alatt az atmoszféra kontrollálható legyen.

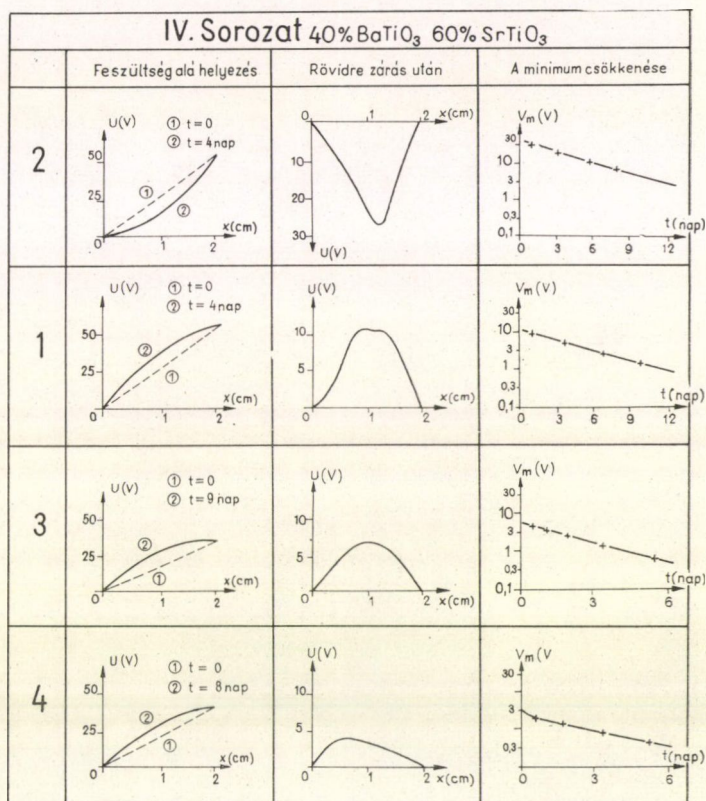
Az 58. ábra bizonyítja, milyen fontos szerepet játszik a poláros atmoszféra:



53. ábra. III. sorozat: 50% BaTiO₃, 50 % SrTiO₃

egy $\text{Ba}_x\text{Sr}_{1-x}\text{TiO}_3$ kerámiánál a konkavitás maximális vízgőz jelenlétében. Ezen a mintán mód nyílt a levegő nedvességének hatását tanulmányozni és látható, hogy van bizonyos összefüggés a potenciáeloszlási görbék görbülete és a páratartalom között (59. ábra).

Egy nedvességre erősen érzékeny kerámiánál megfordítva a potenciálkülönbség irányát és megfigyelve az egyensúly beálltát (60. ábra), az tapasztalható, hogy ki-

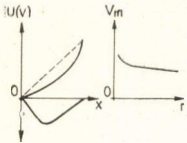
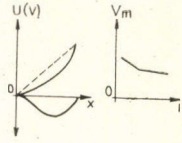
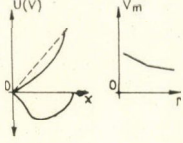
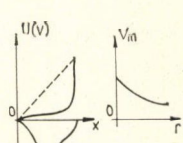
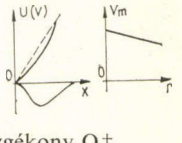
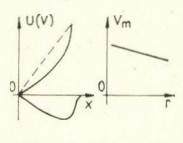


54. ábra. IV. sorozat: 40% BaTiO₃, 60% SrTiO₃

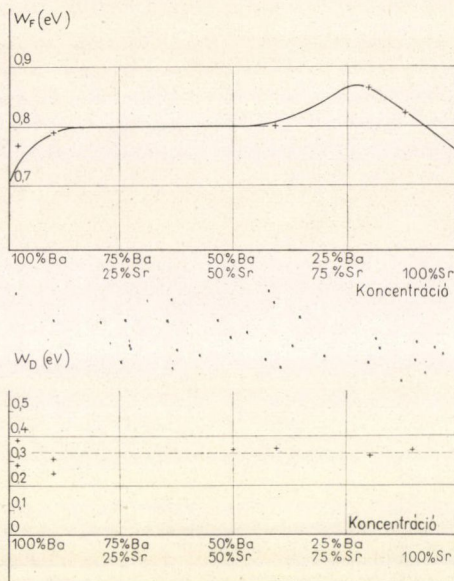
alakult egy nagy ellenállású anódközei réteg, amely ellentétes feszültség esetén lassan változik. A katódközei réteg ellenállása közepes nagyságú; a közbülső tartomány vezet a legjobban. A próbadarab modellizálható az ábrán feltüntetett kapacitás-ellenállás rendszerrel.

A vizsgálatok tökéletesítésének másik módja abban állt, hogy a nedvességre túl érzékeny és ilyen jellegű mérésekhez túl heterogén kerámiákkal nem dolgoztak a továbbiakban; így csak a laboratóriumban előállított és szennyezett egykristályokon vizsgálták meg a potenciáeloszlást. A legújabb eredmények a következők:

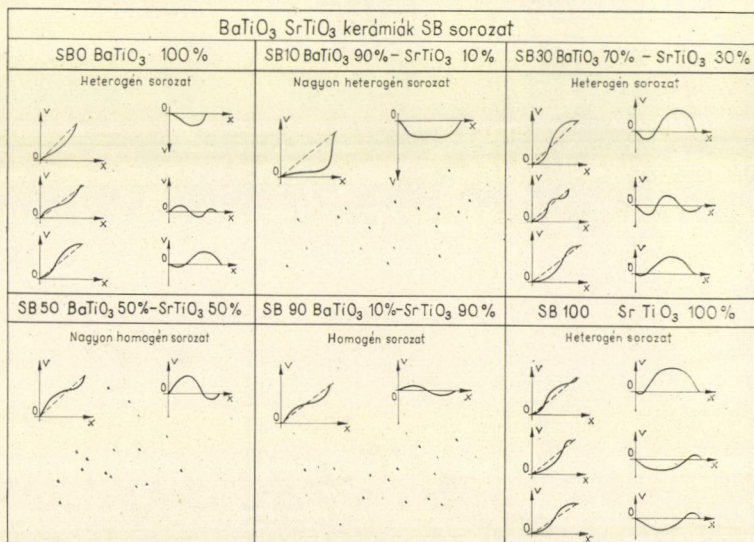
BaTiO₃ SrTiO₃ kerámiák, első gyártási széria

BaTiO ₃ 100%	BaTiO ₃ 98% – SrTiO ₃ 2%	BaTiO ₃ 90% – SrTiO ₃ 10%	BaTiO ₃ 80% – SrTiO ₃ 20%	BaTiO ₃ 50% – SrTiO ₃ 50%
<p>Homogén sorozat</p>  <p>O⁺ vakanciák elmozdulhatnak Ti⁻ vakanciák rögzítettek $W_F = 0,71$ eV $W_D = 0,33$ eV X⁺ szennyezések rögzítettek Y⁻ szennyezések elmozdulhatnak</p>	<p>Homogén sorozat</p>  <p>O⁺ vakanciák elmozdulhatnak (2 mozgékonyaság) Ti⁻ vakanciák rögzítettek $W_F = 0,78$ eV $W_{1D} = 0,37$ eV $W_{2D} = 0,28$ eV</p>	<p>Homogén sorozat</p>  <p>O⁺ vakanciák elmozdulhatnak (2 mozgékonyaság) Ti⁻ vakanciák rögzítettek $W_F = 0,79$ eV $W_{1D} = 0,31$ eV $W_{2D} = 0,25$ eV</p>	<p>Homogén sorozat</p>  <p>O⁺ vakanciák elmozdulhatnak Ti⁻ vakanciák rögzítettek</p>	<p>Heterogén sorozat – 1 tiszta próbadarab O⁺ vakanciák elmozdulhatnak Ti⁺ vakanciák rögzítettek $W_F = 0,78$ eV $W_D = 0,37$ eV – 1 tiszta minta mozgékony, intersticiális O⁻-ok rögzített intersticiális Ti⁻-ok $W_F = 0,76$ eV $W_D = 0,72$ eV – 3 szennyezett minta</p>
BaTiO ₃ 40% – SrTiO ₃ 60%	BaTiO ₃ 20% – SrTiO ₃ 80%	BaTiO ₃ 12% – SrTiO ₃ 88%	SrTiO ₃ 100%	
<p>Heterogén sorozat – 1 tiszta minta mozgékony O⁺ vakanciák rögzített Ti⁻ vakanciák $W_F = 0,73$ eV $W_D = 0,40$ eV – 3 tiszta minta mozgékony intersticiális O⁻-ok rögzített intersticiális Ti⁺-ok $W_F = 0,80$ eV $W_D = 0,35$ eV</p>	<p>Homogén sorozat</p>  <p>mozgékony O⁺ vakanciák rögzített Ti⁻ vakanciák $W_F = 0,86$ eV $W_D = 0,32$ eV</p>	<p>Homogén sorozat</p>  <p>mozgékony O⁺ vakanciák rögzített Ti⁻ vakanciák $W_F = 0,82$ eV $W_D = 0,34$ eV Nincsenek szennyezések</p>	<p>Heterogén sorozat – 1 tiszta minta mozgékony O⁺ vakanciák rögzített Ti⁻ vakanciák $W_F = 0,76$ eV $W_D = 0,36$ eV – 2 minta, a görbület > 0 – 2 minta, a görbület < 0</p>	

1. Nem kezelt báriumtitanát monokristályoknál a potenciáeloszlási görbe nedvesség jelenlétében görbült; ez a görbület vákuumban eltűnik; ha a kristályt H_3PO_4 -val öblítik, a potenciál görbék már nem változnak többet nedves levegőben.

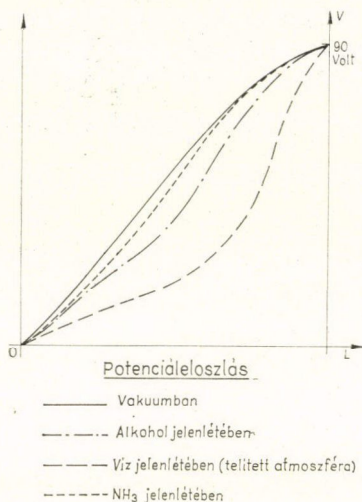


56. ábra. Képződési és mozgási energiák különböző koncentrációk esetén

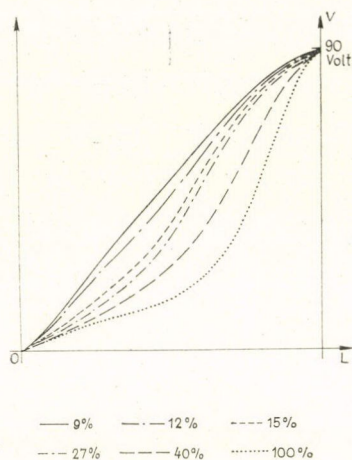


57. ábra. BaTiO₃ SrTiO₃ kerámiák: SB sorozat

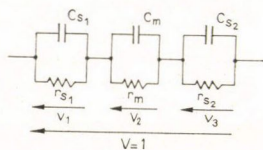
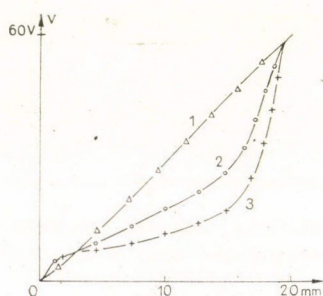
2. Vízgőzt tartalmazó ampullába zárt, így 200 °C-ra hevített és OH-val szennyezett báriumtitanát egykristályokban az egyensúlyi potenciáeloszlás ugyanolyan erősen görbült vákuum esetén, mint nedvesség jelenlétében.



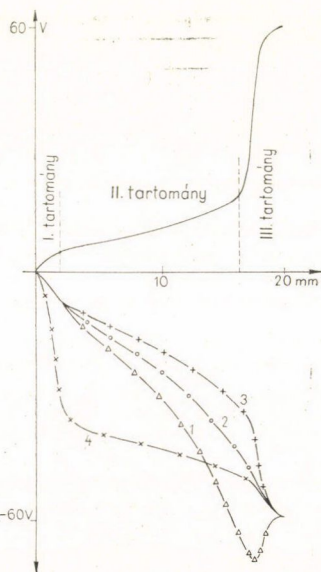
58. ábra. Potenciáeloszlás különböző atmoszférában



59. ábra. Potenciáeloszlás a nedvesség függvényében

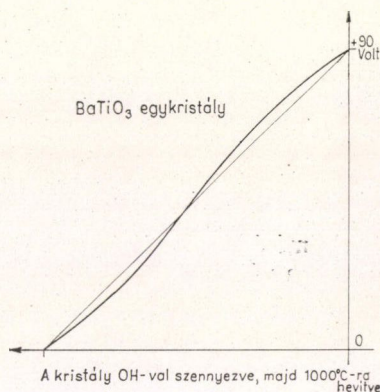


60. ábra. Potenciáeloszlás alakulása ellentétes előjelű polarizálás esetén



3. Ezek a szennyezett kristályok 800 °C-ra való hevítés után elveszítik a vizet és így oxigén vakanciákat tartalmaznak: a potenciáeloszlásban nincsen görbület sem vákuumban, sem nedvesség jelenlétében (61. ábra).

A rezgő szálas berendezés lehetővé teszi, hogy kontrollált atmoszférában megfigyelhessük a potenciáeloszlást a próbadarabok belsejében, ahol nincsenek felületi töltések. A nem lineáris eloszlásoknak az oka lehet egy mozgékony ionokból származó tértöltéses réteg: úgy tűnik ugyanis, hogy az OH-val szennyezett egykristályokban az OH⁻ ionoknak az anód felé való elmozdulásából származik. Minden más esetben az atmoszférikus nedvesség megzavarhatja az eredményeket és megnehezíti az értelmezést. Mivel a kerámiák enyhén parabolikus görbületet adnak, az eredmények összessége úgy magyarázható, hogy az oxigén vakanciák elmozdulnak és a katód közelében gyűlnek össze, a Ti³⁺ ionok a helyükön maradnak egyenletes eloszlásban. Egy másik hipotézis most van vizsgálat alatt: a katódon elektronok injektálódnak, és ezek is létrehozhatnak egy tértöltéses réteget, amely megmutatkozik a potenciáeloszlási görbe felvételekor.



61. ábra. Potenciáeloszlás vakanciákat tartalmazó egykristályon vákuumban és nedvesség jelenlétében

B. Ferroelektromos kristályok optikai tulajdonságai

1. *Elektrolumineszcencia mérések.* Ha egy ferroelektromos kristályt megfelelő körülmények között váltakozó elektromos térbe helyezünk, az fényt bocsát ki. Kis frekvenciákon a fényemisszió a Curie ponton megszűnik és a változása a hőmérséklettel követi a polarizáció változását. Nagy frekvenciákon (négyzetjellel táplálva) az elektrolumineszcencia a Curie ponton maximális. A hőmérséklettel való változása követi a dielektromos állandó változását.

A vizsgálatokat báriumtitanáton végzik, az eredményekből Drougard és Landauer modellje segítségével kiszámítható a domén falak mozgási sebessége.

2. *Optikai injektálás.* Ezek a mérések klasszikus vezetőképesség mérések a katód megvilágítása közben. TGS-re vonatkozó eredmények vannak: az $i=f(V)$ karakterisztika jellege jól magyarázható a Lampert elmélettel; rendelkezik egy függőleges szakasszal, amely a csapdáknak az injektált elektronokkal való megtöltődéséből származik.

3. *Fotoelektromos effektus.* Ezeket a méréseket elektronikus kamerával végzik átlátszó PZT kerámiákon (titanátokon és cirkonátokon). Megfigyelik a kvantumhatásfok változását a megvilágítás időtartamával, a fotoelektromos küszöb csökkenését előzetes megvilágításnál. A fotoelektromos vizsgálatokat azután végezték, hogy egy spektrumot vetítettek a kerámiára: memória effektust tapasztaltak (emisszió a sugarak környezetében a fotoelektromos küszöb csökkenésével); továbbá megfigyelték a kerámia színének változását, de ezt a jelenséget a küszöbnél sokkal nagyobb hullámhosszak is okozhatják és akkor semmi köze a fotoelektromossághoz.

Az anyagra két kereszttezett spektrumot vetítve a klasszikus elméletek által előre nem látott fotoelektromos kép nyerhető: megkísérelük elméletileg vizsgálni a vezetési sávhoz közel eső nagy sűrűségű csapda nívók és a valencia sávhoz közeli rekombinációs centrumok szerepét.

C. Rácsdinamika és a „néma” módus vizsgálata

A méréseket a laboratóriumban előállított RbDP, rubidium dihidrofoszfát kristályon végezték.

1. *Rugalmas állandók és piezoelektromos modulusok mérése.* Ezen konstansok meghatározására a kristályt elektromos térrel gerjesztve rezgetik: a piezoelektromos rezonanciából kiszámíthatók a rugalmas és piezoelektromos modulusok, mivel azokat a kristály orientációja, és a megfigyelt rezgések módusa meghatározza; a kristályt termosztáttal stabilizált környezetbe helyezik és mérik az impedanciáját. Tapasztalat szerint a konstansok a Curie pontnál anomáliát mutatnak (pl. C_{66} zérussá válik). Ez azt látszik bizonyítani, hogy az akusztikus módus instabillá válik és zérushoz tart az optikai módus előtt (Cochran és Kobayashi elméleti fejtegetései).

2. *Elektrokalorikus effektus.* Egy adiabatikus mérőrendszerben mérik a hőmérséklet változását hirtelen alkalmazva egy elektromos teret. Ez az effektus különböző terekben mérve a ferroelektromos átalakulás közelében maximumot mutat a Curie pontnál. A követett törvények nem jellemzőek sem egy elsőrendű, sem egy másodrendű átalakulásra.

3. *Infravörös mérések.* A kristály reflexióképességét egy elég nagy infravörös tartományban regisztrálva alkalmasan megszerkesztett számítási program segítségével megkapható a dielektromos állandó valós és képzetes részének változása ebben a frekvencia tartományban. Azt tapasztalják, hogy ϵ'' -nek maximuma van igen alacsony frekvencián, amelyet a ferroelektromos anyagok „néma” módusának tulajdonítanak. A továbbiakban vizsgálni fogják ennek a változását a hőmérséklettel, különösen a 147°K -on bekövetkező átalakulás közelében.

D. Dielektromos mérések

Mint azt az összes többi módszernél láttuk, elektromos tér, mechanikai rezgetés, elektromágneses hullámok alkalmazásával lehetséges meghatározni a ferroelektromos kristályok különböző jellemző mennyiségeit. De a mérés maga nagymértékben perturbálhatja ezen mennyiségeket, különösen a ferroelektromos átalakulás közelében.

Innen származik az az ötlet, hogy a kristályt mindenféle külső erőter nélkül vizsgálják, csak a minden hőmérsékleten természetesen meglevő termikus gerjesztést felhasználva: ez a zajmérések alapelve. A zajáram analízisével meghatározható a dielektromos állandó valós és képzetes része. Összehasonlítva ezeket az értékeket az automatikus híd módszerrel kapottakkal, láthatjuk, hogy ϵ' anomáliája sokkal élesebben jelentkezik a zajméréseknél. Azonkívül a polarizáció fluktuációjával kapcsolatos képzetes résznek két maximuma jelentkezik az átalakulás közelében, ame-

lyeket a klasszikus mérések — a veszteségi szög mérések a hídnál — nem választanak szét.

Ezen zajmérések érzékenysége lehetővé tette a különböző körülmények között előállított báriumtitanát kerámiák részletes és pontos vizsgálatát és nagyon világosan kimutatta a szinterelés hőmérsékletének és annak a ténynek a szerepét, ha a pépet kihevítés előtt nyomás alá helyezték.

Az előzőkhöz csatlakozik az elméleti kutatók fiatal csoportja, amelynek a feladata annak a magyarázata, hogy a perovszkit struktúra következménye lehet-e a ferroelektromosság vagy sem.

DINAMIKAI SZIMMETRIÁK*

$$A - \frac{1}{r} \text{ potenciál}$$

GYÖRGYI GÉZA

MTA Központi Fizikai Kutató Intézet, Budapest

Bevezetés

Habár a $-\frac{1}{r}$ potenciál problémája, a Kepler-probléma immár több évszázados múltra tekint vissza, s tárgyalása számtalan tankönyvben és monográfiában megtalálható, a legutóbbi években „rejtett” matematikai szimmetriái révén újból magára vonta a figyelmet.

A zárt pályán végbemenő Kepler-mozgások (hatparaméteres) seregét maradéktalanul meghatározza a három Kepler-féle törvény. Első két törvényét „Astronomia nova” (1609), a harmadikat „Harmonices mundi” (1619) c. munkájában tette közzé Kepler [1]. Nevezetes eredménye továbbá a Kepler-egyenlet, mely a mozgás időbeli lefolyására vonatkozik.

Newton dinamikája a mozgások seregének meghatározását lokális jellemzőre, a helyzetvektor második időderiváltjára (ill. az annak m -szeresével egyenlő erőre) vezeti vissza. A Newton-egyenletek nevezetes integrálját találta meg a Kepler-mozgás esetében Laplace [2] (lásd ezenkívül [3, 4]). Laplace integrálja vektoriális mennyiség; a Runge—Lenz-vektor [5, 6] néven is említik az irodalomban.

A Runge—Lenz-vektor hasznosnak bizonyult már Bohr és Sommerfeld régi kvantumelméletében is, kvantummechanikai megfelelője segítségével pedig Paulinak elsőként sikerült leszámaztatnia a kvantummechanikából a kötött hidrogén-spektrumot [7]. Pauli levezetésének alapját az impulzusmomentum és a Runge—Lenz-vektor által kifeszített Lie-algebra képezte; ő azonban nem nevezte meg a felhasznált csoportelméleti fogalmakat.

A csoportelméleti módszer bevezetése a kvantummechanikába Wigner Jenő nevéhez fűződik [8, 9]. Azon csoport meghatározását, amely a H atom „véletlen” elfajulásával van kapcsolatban, Fock tűzte ki feladatul [10]. Fock munkájában kihasználta a probléma Schrödinger-egyenletének az impulzustérben mutatott matematikai tulajdonságait; a „rejtett szimmetriát” oly módon hozta napvilágra, hogy az impulzusteret (a kötött állapotok esetében) egy négydimenziós euklideszi térbeli gömbfelület sztereografikus projekciójaként fogta fel. A Fock eredményei és a hidrogén-színkép Paulitól megadott levezetése között fennálló kapcsolatra Bargmann mutatott rá [11]. (Megemlítenéd azonkívül O. Klein észrevétele a [12] dolgozatban.) A probléma többdimenziós általánosítását illetően lásd a [13, 14] dolgozatokat.

A hatvanas évek közepén a Kepler-probléma dinamikai szimmetriái megújult érdeklődés középpontjába kerültek, ami szorosan összefüggött a csoportelméleti módszer hadronfizikai sikereivel [az SU(3) szisztematika vagy a „nyolcas út”, Gell—Mann és Okubo tömegképlete s az Ω^- hiperon megjósolása, az SU(6) szuper-

* Doktori értekezés. Érkezett 1971. nov. 1.

multiplettek s a mágneses momentumokra nyert összefüggések]. Mindamellett meg kell említenünk az időközben megjelent [15—31] munkákat.

A Kepler-probléma (a H atom) gyakorta szolgált példaképp gyanánt a csoportelméleti módszer hadronfizikai alkalmazásaira irányuló törekvések számára. Ebben a vonatkozásban ismertük meg az egész diszkrét hidrogénspektrumot egyetlen végtelen multiplettbe egyesítő $SO(4,1)$ „spektrumgeneráló csoport” [32—40], valamint az $SO(4,2)$ „teljes dinamikai csoport” [41—53] szerepét. [Ezek „nem-invariancia” csoportok; a *Fock* által talált $SO(4)$ invariancia- vagy degeneráció-csoport mindkettőnek alcsoportja.] Nem egy elméleti fizikus reméli, hogy a pontszerű forrás gravitációs, ill. elektromágnes terében mozgó részecske problémája (Kepler-mozgás, H atom), mely a fizika története folyamán annyiszor játszott különlegesen gyümölcsöző szerepet, így a dinamika s a gravitáció Newton-féle törvényeinek, az atommag létezésének és a kvantumelmélet szabályainak felfedezésében, a relativitáselmélet, a kvantummechanika és a kvantumelektrodinamika eredményeinek ellenőrzésében, segítséget fog nyújtani a hadronok dinamikájának megalkotásához is. Másrészről figyelmet érdemel, miként bontakoztak ki előttünk fokról fokra az elméleti fizika fejlődésének egyes szakaszaiban a probléma dinamikai szimmetriái: *Laplace* analitikus mechanikájában a mozgásállandók teljes rendszere, *Pauli* és *Fock* nevezetes kvantummechanikai munkáiban a megmaradó vektorok képezte Lie-algebra s az $SO(4)$ invariancia-csoport, végül a részecskék rendszerének és dinamikájának csoportelméleti leírásával kapcsolatban a nagyobb $SO(4,1)$, $SO(4,2)$ csoportok.

Noha a Kepler-probléma a fent idézett dolgozatokban sokrétű elemzés tárgyát képezte, több olyan kérdés maradt, amely behatóbb vizsgálatot érdemel.

A Kepler-probléma, ami a dinamikai szimmetriáit illeti, mint fent is láttuk, korántsem triviális. A térbeli rotátor dinamikai csoportjai [54, 55] szorosan összefüggnek a térbeli forgásszimmetriával. Ebben az esetben (manifeszt) geometriai szimmetriáról beszélhetünk. A harmonikus oszcillátor [16] rendelkezik nem-geometriai természetű szimmetriákkal is (ilyenkor beszélünk „rejtett szimmetriák”-ról). Mindamellett a harmonikus oszcillátor dinamikai szimmetriái könnyű nyilvánvalóvá tenni, s a kvantummechanikában ez reprezentációtól függetlenül megtehető. Mindkét esetben csaknem közvetlenül látni a primitív dinamikai változóknak a dinamikai transzformáció-csoportokkal szemben mutatott transzformációs jellegét; ez lehetővé teszi, hogy bármilyen fizikai mátrixelemet a dinamikai csoportok generátorainak mátrixelemei segítségével kifejezzünk.

Pauli idézett dolgozatában [7] megállapítást nyertek a Kepler-probléma mozgásállandóinak (impulzusmomentum, Runge—Lenz-vektor) a dinamikai invariancia-transzformációkkal szemben mutatott tulajdonságai; a primitív dinamikai változók transzformációs tulajdonságaira (s az ezekkel összefüggő fizikai problémákra, mint a dipólátmenetek valószínűségeire) nem terjedt ki *Pauli* figyelme. *Fock* viszont a probléma impulzusreprezentációban felírt Schrödinger-egyenletének speciális tulajdonságait használta ki; új változók és új függvény bevezetésével a négydimenziós gömbfüggvényének integrálegyenletét kapta [10]. Az impulzustér *Fock* által alkalmazott leképezésének különleges tulajdonsága, hogy energiafüggő; azonfelül a hullámfüggvényre alkalmazott transzformáció a valószínűségeket általában nem hagyja változatlanul. Felvethetjük a kérdést: miként lehet *Fock* elméletét a megszokott kvantálási módszer alapját képező kanonikus formalizmus keretei közé beilleszteni? Speciálisan használhatjuk-e a Fock-változókat kanonikus változóként és melyek azok kanonikus konjugáltjai? A valószínűség megváltozása *Fock*

transzformációja során mutatja, hogy itt nyilván nem unitér (ill. kanonikus) transzformációval állunk szemben. A kanonikus formalizmus keretei közé való beillesztés így kétségtől csak a kanonikus transzformációk fogalmának kibővítése árán érhető el.

Kíváncsún látszik továbbá a Kepler-problémának olyan megfogalmazást adni, amely kezdettől fogva szembeszökően kifejezi a kötött állapotokra az $SO(4)$, pozitív energia mellett pedig az $SO(3,1)$ csoporttal szemben mutatott invarianciát.

A klasszikus Kepler-probléma $SO(4,1)$ spektrumgeneráló csoportjának generátorait kötött állapotokra először Bacry határozta meg [32]; a Bacry-generátorok kvantummechanikai megfelelőit pedig Pratt és Jordan [39], valamint Musto [40] közölte. A klasszikus $SO(4,1)$ generátorokat Bacry a megfelelő Poisson-zárójeles összefüggések szolgáltatása differenciálegyenletek megoldása útján nyerte. A Bacry-generátorok a primitív dinamikai változóknak meglehetősen bonyolult kifejezései, pl. a térbeli rotátor vagy a harmonikus oszcillátor nem-invariancia generátoraihoz képest, ami feltűnő ellentétben áll a kielégítendő zárójeles összefüggések egyszerű alakjával. Kézenfekvő a sejtés, hogy a Bacry-generátorokhoz más, egyszerűbb úton is eljuthatunk, ha a dinamikai szimmetriákkal kapcsolatos magasabb dimenziós terekben végzett geometriai megfontolásokhoz folyamodunk. A kvantummechanikai generátorok megszerkesztéséhez Pratt és Jordan, valamint Musto felhasználta a H atom sajátfüggvényeinek explicit alakját helyreprezentációban, gömbi, ill. parabolikus koordinátákban; azonfelül a Schrödinger-féle faktorizációs módszerre [56, 57] támaszkodtak. Feltételezhetően a kvantummechanikai generátorokhoz is eljuthatunk a magasabb dimenziós dinamikai szimmetriák fokozott mérvű kiaknázásával, lehetőleg elkerülve valamely konkrét reprezentáció, speciális koordináta-rendszer, s a Schrödinger-féle sajátfüggvények explicit alakjának a felhasználását. Megemlíthetjük még, hogy pozitív energiára Bander és Itzykson ugyancsak az $SO(4,1)$ csoportot használja spektrumgeneráló csoportként [37], Mukunda, O'Rai feartaigh és Sudarshan viszont az $SO(3,2)$ csoportot említi ebben a szerepben [35].

Figyelmet érdemel ezen felül a H atom Schrödinger-egyenletének megoldásakor általában alkalmazott energiafüggő skálatranszformáció kapcsolata a dinamikai szimmetriákkal, továbbá a H atom „patologikus” [42] jellege. Ez abban áll, hogy itt az elektromos dipól-átmenetek bármely két n, n' főkvantumszámú állapot között végbemehetnek; ez a vonása is megkülönbözteti a H atomot a rotátortól és a harmonikus oszcillátortól.

Végül kíváncsún látszik továbbá a Kepler-problémának olyan megfogalmazást adni, amely nyilvánvalóvá teszi annak $SO(4,2)$ szimmetriáját.

A jelen értekezés mindenekelőtt a klasszikus Kepler-probléma olyan tárgyalását adja meg, amely szembetűnően kifejezi a kötött állapotokra az $SO(4)$, pozitív energia mellett pedig az $SO(3,1)$ csoporttal szemben mutatott invariancia-szimmetriát. A négydimenziós geometria tárgyalásmód az (1.18), (1.19) alatt definiált q_α, π_α négykomponensű mennyiségek bevezetése folytán válik lehetővé. Célszerűnek bizonyul azonfelül egy τ invariáns idő-paramétert bevezetni. Alternatív négydimenziós tárgyalásmódot tesz lehetővé az (1.46), (1.47) „Bacry-változók” bevezetése; ezek használata biztosítja a dt idődifferenciál invarianciáját.

A π_α mennyiség négyesvektor-jellege ad magyarázatot arra, hogy miért éppen a Fock által alkalmazott sztereografikus projekció hozza napvilágra a probléma $SO(4)$ invariancia-szimmetriáját. A q_α mennyiség négyesvektor-jellege pedig azt világítja meg, hogy miért marad rejtve ez a szimmetria a szokásos helyreprezentá-

cióban. A \mathbf{q} helyzetvektor nem egyszerű transzformációs tulajdonságokkal rendelkező, kovariáns mennyiség négy dimenzióban; nem a vonzócentrumra vonatkoztatott \mathbf{q} , hanem a tömegpont helyzetét a pálya geometriai középpontjához viszonyítva megadó $\mathbf{q} - \mathbf{e}$ vektor az, amely (1.18) szerint egy négyesvektor háromdimenziós térbeli komponensét képezi. Az idő $t \rightarrow \tau$ transzformációjának szükségessége pedig lehetővé teszi, hogy megértsük, miért változik meg a valószínűség Fock transzformációja során. Az (1.36) mozgásegyenletek a kötött állapotok esetében, időnek τ -t tekintve, egyenletes körmozgást írnak le négy dimenzióban. Egyenletes körmozgást végez Fock $\xi_\alpha = p_0^{-1} \pi_\alpha$ négyesvektora is, és ξ_α klasszikus valószínűség-eloszlása ezen körpálya mentén egyenletes. A t fizikai idő mellett érvényes eloszlás ennek az egyenletes eloszlásnak a $\frac{dt}{d\tau} = \frac{q}{a}$ -szorososa. Ez a tényező (1.1), (1.2) felhasználásával

lásával a $\frac{2p_0^2}{p_0^2 + p^2}$ alakban is felírható. A H atom Fock-féle elméletében a \mathbf{p} -térbeli $|\Phi(\mathbf{p})|^2 d^3p$ valószínűség a négydimenziós egységgömbön végbemenő tehetetlenségi mozgásnak megfelelő $|\hat{\Phi}(\xi_\alpha)|^2 d^4\Omega_\xi$ valószínűségből éppen ezen $\frac{2p_0^2}{p_0^2 + p^2}$ tényezővel való szorzás útján áll elő.

Tárgyalja továbbá az értekezés a Kepler-pályák származtatását a négydimenziós invariancia-szimmetriából kiindulva, s a hodográfra vonatkozóan végezhető analóg megfontolásokat is. Kiténik, hogy a τ idő-paraméter, mely lehetővé teszi, hogy a Fock-változókat kanonikus változóknak tekintsük, kötött állapotokra arányos a Keplertől bevezetett w excentrikus anomáliával (lásd pl. [58]).

A kanonikus formalizmus keretei között megmutatjuk, hogy a H atom Schrödinger-egyenletének megoldására általában alkalmazott energiafüggő skálatranszformációval ($\mathbf{x} = \sqrt{\mp 2mE} \mathbf{q}$ és $\mathbf{y} = \mathbf{p}/\sqrt{\mp 2mE}$) nyert változók mozgásegyenletei számára biztosítható a kanonikus alak a τ paraméter bevezetésével. Az áttérés a \mathbf{q} , \mathbf{p} dinamikai változókról és a t időről \mathbf{x} -re, \mathbf{y} -ra és τ -ra mint kibővített kanonikus transzformáció [59, 60] írható le. Foglalkozunk azonkívül a kanonikus formalizmus kiterjesztésével a négydimenziós változók (így π_α , q_α és b_α , c_α) esetére, melyek bizonyos mellékfeltételeknek tesznek eleget. A három- és négydimenziós leírás között a kapcsolat a Dirac-féle zárójeles kifejezés [61, 62] segítségével fogalmazható meg.

Közljük az értekezésben a klasszikus Kepler-probléma $SO(4,2)$ teljes dinamikai csoportjának generátorait mind a t , mind a τ időparaméter választása mellett. Eredményeinkhez egyszerű geometriai megfontolással jutunk, s azok magukban foglalják a Bacry által nyert generátorokat. Eljárásunk világossá teszi a Bacry által nyert kifejezések kapcsolatát a q_α , π_α változókkal és a τ idővel, s rajtuk keresztül Fock elméletével. Kiténik továbbá, hogy a Bacry által talált $SO(4,1)$ csoport pozitív energiás megfelelője az $SO(4,1)$ és az $SO(3,2)$ csoport egyaránt lehet; az $SO(4,2)$ teljes dinamikai csoportnak mindketten alsó csoportját képezik. Foglalkozunk a dinamikai csoportok integrálásának — problematikus — kérdésével [27].

A klasszikus $SO(4,2)$ generátorok megszerkesztésével s a rájuk érvényes azonosságok tenzoralakban való felírásával maradéktalanul kifejezésre juttattuk a probléma $SO(4,2)$ szimmetriáját. Beszélhetünk a probléma „tisztán csoportelméleti” vagy „geometriai” megfogalmazásáról. (A szimmetria annyit jelent, hogy a teljes dinamikai csoport transzformációit adott mozgásállapotra alkalmazva mindenkor valamely lehetséges mozgásállapotot nyerünk. Az egyes dinamikai transzformációk

jelentése természetesen eltérő, amint az egyes generátorok is más-más fizikai mennyiséget reprezentálnak.)

A kvantummechanikában az x, y leírást választjuk kiindulásként. A kvantummechanikai — hermitikus — $SO(4,2)$ generátorok megszerkesztése útjában felmerülő nehézségek [50] megkerülésére egy lehetséges utat javasolunk. Az $SO(4,2)$ generátorok ismeretében leszámaztatjuk a diszkrét sajátfüggvények rekurziós összefüggéseit, valamint a diszkrét és folytonos sajátfüggvényeket összekötő transzformációs mátrix elemeire érvényes rekurziós összefüggéseket. Megállapítva azt a (nem-unitér) kvantummechanikai operátort, amely az $x \rightarrow q, y \rightarrow p, \tau \rightarrow t$ kibővített kanonikus transzformációnak felel meg, előállítjuk az $SO(4,2)$ generátoroknak a H atom megszokott Schrödinger-féle sajátfüggvényeire ható alakját.

Köszönetnyilvánítás

Köszönettel tartozom a MTA Központi Fizikai Kutató Intézetének, *Jánosy Lajos* akadémikus, v. igazgatónak, *Pál Lénárd*, a MTA levelező tagja, igazgatónak, főosztályom és laboratóriumom vezetőinek és kollégáimnak, akik lehetőséget és támogatást nyújtottak e munka elvégzéséhez.

A munka egy részét a trieszti Nemzetközi Elméleti Fizikai Központban és az Orsay-i Természettudományi Kar Magfizikai Intézetének Elméleti Fizikai Osztályán végeztem. Köszönet illeti *Abdus Salam* és *Paolo Budini* professzort azért, hogy lehetővé tették számomra a munkát a trieszti Központban, valamint vendégszeretetükért. Ugyancsak köszönet illeti meg a Francia Atomenergia-bizottság Juliot-Curie Ösztöndíjakat Odaitélő Bizottságát, mely egyéves ösztöndíjban részesített, valamint *Roger Nataf* professzort, ki Orsayban szívélyes vendégszeretetet tanúsított irántam.

Hálával tartozom a Magyar Tudományos Akadémiának a külföldi tanulmányutaim idejére engedélyezett rendkívüli szabadságért.

Kellemes kötelességem kifejezést adni lekötelezettségemnek *Marx György*, a MTA levelező tagja iránt, ki sok évvel ezelőtt — midőn mint diák az egyetemen előadásait hallgattam — nyomatékosan hangsúlyozta a csoportelméleti módszerek fontosságát az elméleti fizikában és a figyelmemet felhívta a tanulmányozásukra. Hasonlóképpen le vagyok kötelezve nagyrabecsült barátom, *Károlyházy Frigyes*, a fizikai tudományok kandidátusa iránt, kitől az évek során folytatott számos eszmecserében igen sokat tanultam a csoportelméleti módszer fizikai alkalmazásairól.

Az értekezés tárgyát képező kérdésekről alkalmam volt több előadást tartani, így a budapesti, az oxfordi, a párizsi, a kölni, a bécsi, a gráci és a pozsonyi egyetemen, valamint a marseillei és a trieszti elméleti fizikai központban. Az oxfordi meghívásért *C. A. Coulson, F. R. S.*, a kölniért *B. Mühlischlegel*, a bécsiért *H. Pietschmann*, a marseilleiért *H. Bacry* professzornak, a pozsonyiért pedig *Dr. Mikuláš Blažek*nek tartozom köszönettel. Gyümölcsöző diskusziókat folytathattam *E. Arnous, H. Bacry, L. C. Biedenharn, C. Fronsdal, Y. Ne'eman* és *C. Wulfsman* professzorral, valamint *Dr. A. Joseph-fel, J. Lánik-kal, J. T. Lewis-szel, J. Niederlé-vel, R. Rączka-val* és *T. Todorov-val*, amiért fogadják köszönetemet. Különös hálára vagyok kötelezve *Dr. Gyarmati Borbála* iránt a tárgyról folytatott számos beszélgetésért, továbbá *Ladányi Károly*, a fizikai tudományok kandidátusa ránt, ki mint opponensem a nemkompakt csoportok tanulmányozására ösztönzött.

1. Invariancia-transzformációk

A probléma fontos mozgásállandóját, a

$$H = \frac{p^2}{2m} - \frac{g}{q} \quad (1.1)$$

Hamilton-függvény számértékét, az $E \equiv H$ energiát célszerűen két további módon is

fogjuk jelölni:

$$E \equiv \mp \frac{p_0^2}{2m} \equiv \mp \frac{g}{2a}, \quad (1.2)$$

ahol p_0 impulzus-, a pedig hossz-dimenziójú nemnegatív mennyiség; itt és a következőkben a felső előjel a kötött, az alsó pedig a pozitív energiájú mozgásállapotok esetére vonatkozik. Nevezetes vektoriális mozgásállandók az

$$\mathbf{L} = \mathbf{q} \times \mathbf{p} \quad (1.3)$$

impulzusmomentum-vektor, valamint a numerikus excentricitás

$$\varepsilon = \frac{\mathbf{q}}{q} - \frac{\mathbf{p} \times \mathbf{L}}{mg} \quad (1.4)$$

vektora; ez utóbbit említik a Laplace—Hamilton-integrál vagy a Lenz—Runge-vektor néven is. Ha $p_0 \neq 0$, célszerűbb ehelyett

$$\mathbf{K} = \pm \frac{mg}{p_0} \left(\frac{\mathbf{q}}{q} - \frac{\mathbf{p} \times \mathbf{L}}{mg} \right) \quad (1.5)$$

használata. Az \mathbf{L} , \mathbf{K} vektorokra fennáll:

$$\mathbf{LK} = 0. \quad (1.6)$$

A Hamilton-függvényt (energiát), ha értéke zérustól különböző, a következőképpen fejezhetjük ki \mathbf{L} és \mathbf{K} segítségével:

$$H = -\frac{mg^2}{2} (\mathbf{L}^2 \pm \mathbf{K}^2). \quad (1.7)$$

Célszerű \mathbf{L} és \mathbf{K} komponenseit a következő 4×4 -es antiszimmetrikus szkémába elrendezni:*

$$(M_{\alpha\beta}) = \begin{pmatrix} 0 & L_3 & -L_2 & (\pm)^{-\frac{1}{2}} K_1 \\ -L_3 & 0 & L_1 & (\pm)^{-\frac{1}{2}} K_2 \\ L_2 & -L_1 & 0 & (\pm)^{-\frac{1}{2}} K_3 \\ -(\pm)^{-\frac{1}{2}} K_1 & -(\pm)^{-\frac{1}{2}} K_2 & -(\pm)^{-\frac{1}{2}} K_3 & 0 \end{pmatrix}; \quad (1.8)$$

itt $(\pm)^{-\frac{1}{2}}$ egy i^{-1} faktor felléptét jelzi pozitív energia esetén. Ezzel a jelöléssel a Hamilton-függvény a

$$H = -mg^2 (M_{\kappa\lambda} M_{\kappa\lambda})^{-1} \quad (1.9)$$

alakban írható fel; az (1.6) feltétel pedig így írható:

$$\varepsilon_{\kappa\lambda\mu\nu} M_{\kappa\lambda} M_{\mu\nu} = 0. \quad (1.10)$$

Ha $(M_{\alpha\beta})$ -t $E < 0$ mellett az $(a_{\alpha\beta})$ valós 4×4 -es ortogonális mátrixok segítségével másodrendű tenzorként transzformáljuk, úgy az (1.9) Hamilton-függvény értéke és az (1.10) feltétel alakja változatlan marad; $E > 0$ esetén hasonló invariancia áll

* A görög kisbetűvel jelölt indexek az 1, 2, 3, 4 értékeket veszik fel. Kétszer fellépő indexekre (az értekezésben mindenütt) összegezni kell.

fenn, ha $(M_{\alpha\beta})$ -t a Lorentz-transzformációk $(a_{\alpha\beta})$ mátrixai segítségével transzformáljuk (most a_{kl} , a_{44} , ia_{k4} , ia_{4l} valós).^{*} Mivel adott $(M_{\alpha\beta})$, ill. \mathbf{L} és \mathbf{K} , ha (1.10), ill. (1.6) teljesül, egy-egy pályát határoznak meg, itt dinamikai szimmetria-transzformációkkal állunk szemben; továbbá, mivel H változatlan marad, e transzformációk a Hamilton-függvény invariancia-transzformációi.

Annak érdekében, hogy ezen dinamikai invariancia szimmetria-transzformációkról teljes képet alkothassunk, tudni szeretnénk, miképpen transzformálódnak a primitív dinamikai változók: a \mathbf{q} helyzetvektor és a \mathbf{p} impulzus, ill. hogy miként alkothatók belőlük pl. olyan mennyiségek, amelyek négyesvektor módjára transzformálódnak.

Képezzük először a $\mathbf{p} \times \mathbf{K}$ vektorszorzatot; (1.5) és a kettős vektorszorzat kifejtési tételének felhasználásával kapjuk:

$$\mathbf{p} \times \mathbf{K} \pm \frac{mg}{p_0} \left(\frac{1}{q} - \frac{p^2}{mg} \right) \mathbf{L} = 0; \quad (1.11)$$

az (1.1) és (1.2) képleteket felhasználva ehelyett írható:

$$\mathbf{p} \times \mathbf{K} + \frac{p_0^2 \mp p^2}{2p_0} \mathbf{L} = 0. \quad (1.12)$$

Fennáll továbbá:

$$\mathbf{p} \mathbf{L} = 0. \quad (1.13)$$

Az (1.13) egyenlet adott \mathbf{L} mellett \mathbf{p} mozgását az impulzusmomentum-vektorra merőleges síkra korlátozza. Azon görbe pontjai, amelyet mozgása során \mathbf{p} (vagy $\mathbf{v} = \mathbf{p}/m$; ez utóbbi görbe a hodográf) leír — a \mathbf{K} , \mathbf{L} , $E = \mp p_0^2/2m$ mozgásállandók megadott értékei mellett — az (1.12) egyenletnek tesznek eleget.

Most képezzük $\mathbf{q} \times \mathbf{K}$ -t; az (1.5) képlet és a kettős vektorszorzat kifejtési tételének felhasználásával írhatjuk:

$$(\mathbf{q} - \mathbf{e}) \times \mathbf{K} \mp \frac{1}{p_0} (\mathbf{q} \mathbf{p}) \mathbf{L} = 0, \quad (1.14)$$

vagy a második tagot az $\mathbf{L}^2 = q^2 p^2 - (\mathbf{q} \mathbf{p})^2$ azonosság, valamint (1.1), (1.2), (1.5), (1.7) felhasználásával átalakítva:

$$(\mathbf{q} - \mathbf{e}) \times \mathbf{K} + \sqrt{\pm [a^2 - (\mathbf{q} - \mathbf{e})^2]} \mathbf{L} = 0 \quad (1.15)$$

(a $\sqrt{}$ előjelét mindenkor $\mp \mathbf{q} \mathbf{p}$ előjelével megegyezőnek kell választanunk); az itt bevezetett

$$\mathbf{e} = \frac{1}{p_0} \mathbf{K} \quad (1.16)$$

vektort nevezhetjük a lineáris excentricitás vektorának (\mathbf{e} az erőcentrumot a pálya-ellipszis, ill. -hiperbola geometriai középpontjával összekötő vektor). Fennáll továbbá:

$$(\mathbf{q} - \mathbf{e}) \mathbf{L} = 0. \quad (1.17)$$

* A latin kisbetűvel jelölt indexek az 1, 2, 3 értékeket veszik fel.

Ez utóbbi egyenlet azt tükrözi vissza, hogy \mathbf{q} mozgása az \mathbf{L} -re merőleges síkban megy végbe. A pálya pontjai azonfelül kielégítik — a mozgásállandók adott \mathbf{K} , \mathbf{L} , $E = \mp g/2a$ értékei mellett — az (1.15) egyenletet.

Kézenfekvő bevezetni a [63]

$$\mathbf{q} = \mathbf{q} - \mathbf{e}, \quad \varrho_4 = (\pm)^{-\frac{1}{2}} \sqrt{\pm[a^2 - (\mathbf{q} - \mathbf{e})^2]}; \quad (1.18)$$

$$\pi = \frac{2p_0^2}{p_0^2 \pm p^2} \mathbf{p}, \quad \pi_4 = (\pm)^{-\frac{1}{2}} \frac{p_0^2 \mp p^2}{p_0^2 \pm p^2} p_0 \quad (1.19)$$

képletekkel meghatározott ϱ_α , π_α négykomponensű mennyiségeket. Ennek az alaknak előnye, hogy adott \mathbf{K} , \mathbf{L} , E mellett a hosszúság-dimenziójú ϱ_α egyedül \mathbf{q} -tól, az impulzus-dimenziójú π_α egyedül \mathbf{p} -től függ; de hasznos a

$$\mathbf{q} = \pm a \left[\frac{\mathbf{q}}{q} - \frac{(\mathbf{q}\mathbf{p})\mathbf{p}}{mg} \right], \quad \varrho_4 = -(\pm)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{p_0} \mathbf{q}\mathbf{p}; \quad (1.20)$$

$$\pi = \pm \frac{q}{a} \mathbf{p}, \quad \pi_4 = (\pm)^{-\frac{1}{2}} p_0 \left(1 - \frac{q p^2}{mg} \right) \quad (1.21)$$

alternatív felírás is [vö. (1.11), (1.14)]; az átalakításnál azonkívül figyelembe vettük az (1.1), (1.2), (1.5), (1.16) képleteket].

Fennáll:

$$\varrho_\lambda \varrho_\lambda = a^2, \quad (1.22)$$

$$\pi_\lambda \pi_\lambda = \pm p_0^2. \quad (1.23)$$

Az

$$\varepsilon_{\alpha\lambda\mu\nu} \varrho_\lambda M_{\mu\nu} = 0, \quad (1.24)$$

$$\varepsilon_{\alpha\lambda\mu\nu} \pi_\lambda M_{\mu\nu} = 0 \quad (1.25)$$

négykomponensű egyenletek az (1.14), ill. (1.15) és (1.17), valamint az (1.11), ill. (1.12) és (1.13) összefüggéseket foglalják tömören össze. Az (1.1), (1.22), (1.23) képletek alapján írható:

$$\frac{\pi_\lambda \pi_\lambda}{m} \mp \frac{g}{(\varrho_\lambda \varrho_\lambda)^{\frac{1}{2}}} = 0; \quad (1.26)$$

(1.20) és (1.21) felhasználásával kapjuk:

$$\varrho_\lambda \pi_\lambda = 0. \quad (1.27)$$

Fennáll továbbá [63]

$$M_{\alpha\beta} = \varrho_\alpha \pi_\beta - \varrho_\beta \pi_\alpha; \quad (1.28)$$

erről (1.1), (1.2), (1.5), (1.8), (1.20), (1.21) segítségével győződhetünk meg. Skalárisan megszorozva (1.28) mindkét oldalát ϱ_β -val, majd π_β -val, (1.27)-et figyelembe véve kapjuk a

$$\pi_\alpha = -(\varrho_\beta \varrho_\beta)^{-1} M_{\alpha\beta} \varrho_\beta, \quad (1.29)$$

$$\varrho_\alpha = (\pi_\beta \pi_\beta)^{-1} M_{\alpha\beta} \pi_\beta \quad (1.30)$$

összefüggéseket.

Ha q_α -t és π_α -t $E < 0$ mellett a fent említett valós 4×4 -es $(a_{\alpha\beta})$ ortogonális mátrixok segítségével mint négyesvektorokat transzformáljuk, úgy mindenekelőtt (1.28) értelmében $M_{\alpha\beta}$ a kívánt módon, másodrendű tenzorként transzformálódik; (1.9), (1.22) és (1.23) szerint az energia (a Hamilton-függvény értéke) eközben változatlan marad; azonfelül az (1.10), (1.24–30) összefüggések mind megőrzik alakjukat. Hasonló megállapítások tehetők $E > 0$ esetén, ha q_α -t és π_α -t a Lorentz-transzformációk 4×4 -es $(a_{\alpha\beta})$ mátrixai segítségével transzformáljuk négyesvektorként.

A szóban forgó összefüggések közül (1.26) és (1.27) a q_α , π_α ($\alpha = 1, 2, 3, 4$) változó-párok — melyeket a hat q_i , p_i primitív dinamikai változó segítségével értelmeztünk — között fennálló mellékfeltételek (kényszerfeltételek). Az (1.24), (1.25) képletek felfoghatók mint az adott $M_{\alpha\beta}$ -hoz tartozó pálya és hodográf egyenletének „szembeszökően szimmetrikus” alakja. Az (1.28), (1.29) és (1.30) egyenletek pedig lehetővé teszik, hogy π_α , q_α , $M_{\alpha\beta}$ közül kettőt ismerve kiszámítsuk a harmadikat.

A q_α , π_α négykomponensű változók mozgásegyenleteit leszámaztathatjuk közvetlenül a

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = -\frac{\mathbf{g}}{q^2} \cdot \frac{\mathbf{q}}{q} \quad (1.31)$$

Newton-egyenletből, ahol természetesen

$$\mathbf{p} = m \frac{d\mathbf{q}}{dt}. \quad (1.32)$$

Az imént talált kinematikai összefüggések, valamint $M_{\alpha\beta}$ mozgásállandó voltának ismeretében el is kerülhetjük az (1.31) mozgásegyenletre való közvetlen hivatkozást. Valóban, (1.18), (1.21), (1.32), valamint (1.22), (1.23), (1.29), (1.30) felhasználásával kapjuk:

$$\pm \frac{q}{a} \frac{dq_\alpha}{dt} = \frac{1}{m} \pi_\alpha, \quad \frac{q}{a} \frac{d\pi_\alpha}{dt} = -m\omega^2 q_\alpha, \quad (1.33)$$

ahol

$$\omega = \frac{p_0}{ma}. \quad (1.34)$$

A dt idődifferenciál tehát q_α , π_α fent leírt négyesvektor-transzformációival szemben nem invariáns. Ezzel szemben a

$$d\tau = \pm \frac{a}{q} dt \quad (1.35)$$

kombináció invariáns; kézenfekvő ennél fogva τ -t mint új „idő”-paramétert bevezetni. Ily módon (1.33) helyett írható:

$$\frac{dq_\alpha}{d\tau} = \frac{1}{m} \pi_\alpha, \quad \frac{d\pi_\alpha}{d\tau} = \mp m\omega^2 q_\alpha. \quad (1.36)$$

Az (1.36) mozgásegyenletek kötött állapotok esetén a négydimenziós euklideszi tér a sugarú gömbjén végzett tehetetlenségi mozgást írnak le; ha az energia pozitív, a mozgás négy dimenzióban gömb helyett egyköpenyű forgási hiperboloidon megy végbe.

A négydimenziós leírás Q_α, π_α helyett történhet a $\xi_\alpha = p_0^{-1} \pi_\alpha$, $\eta_\alpha = -p_0 Q_\alpha$ változók segítségével is; $M_{\alpha\beta}$ ezekkel kifejezhető az (1.28) mintára:

$$M_{\alpha\beta} = \xi_\alpha \eta_\beta - \xi_\beta \eta_\alpha, \quad (1.37)$$

azonkívül (1.24), (1.25) és (1.29), (1.30) analógjai is teljesülnek. Mellékfeltételként (1.23)-ból és (1.27)-ből a

$$\xi_\lambda \xi_\lambda = \pm 1, \quad (1.38)$$

$$\xi_\lambda \eta_\lambda = 0 \quad (1.39)$$

relációkat nyerjük.

A ξ_α változókat Fock felhasználta a H atom kötött állapotainak véletlen el-fajulásáról írott munkájában [10]. Ily módon $E < 0$ mellett az

$$\mathbf{y} = \frac{\mathbf{p}}{p_0} \quad (1.40)$$

energiafüggő skálatranszformációnak alávetett impulzusteret a $\xi \left(\frac{2\mathbf{y}}{1+y^2}, \frac{1-y^2}{1+y^2} \right)$ sztereografikus projekcióval a négydimenzió euklideszi tér egységgömbjének felszínére képezte le; a Schrödinger-féle energiasajátérték-egyenlet megoldásait a négydimenziós gömbfüggvények alakjában nyerte. A kötött H atom és a négydimenziós merev rotátor állapotai között eszerint megfeleltetés létesíthető. Megjegyezzük, hogy a mozgás frekvenciája (1.2), (1.9) és (1.34) szerint a négydimenziós impulzusmomentum $(M_{\kappa\lambda} M_{\kappa\lambda})^{\frac{1}{2}}$ nagyságának -3 -ik hatványával arányos; a rotátornál megszokott függést, az impulzusmomentum első hatványával arányos frekvenciát oly módon nyerhetünk, ha τ helyett új $\bar{\tau}$ idő-paramétert vezetünk be. Teljesítse $\bar{\tau}$ az $\bar{\omega} d\bar{\tau} = \pm \omega d\tau$ ($\bar{\omega} = p_0 a/m$) feltételt; ekkor azt találjuk, hogy ξ_α, η_α mozgásegyenletei (1.36)-ból a $Q_\alpha \rightarrow \xi_\alpha$, $\pi_\alpha \rightarrow \eta_\alpha$, $\tau \rightarrow \bar{\tau}$, $\omega \rightarrow \bar{\omega}$ helyettesítéssel nyerhetők.

Az (1.40) energiafüggő skálatranszformáció, kiegészítve a \mathbf{q} helyzetvektor

$$\mathbf{x} = p_0 \mathbf{q} \quad (1.41)$$

transzformációjával, más tekintetben is hasznos. Az impulzusmomentum most is az (1.3) alakot mutatja:

$$\mathbf{L} = \mathbf{x} \times \mathbf{y}; \quad (1.42)$$

a Lenz—Runge-vektor (1.1), (1.2) segítségével hívásával a

$$\mathbf{K} = \frac{1}{2} (1 \mp y^2) \mathbf{x} \pm (\mathbf{x}\mathbf{y}) \mathbf{y} \quad (1.43)$$

egyszerű alakban írható fel. Felhasználva az (1.7), (1.42), (1.43) képleteket, a Hamilton-függvényt a

$$H = \mp \frac{mg^2}{2N^2} \quad (1.44)$$

alakban nyerjük, ahol

$$N = \frac{1}{2} x(1 \pm y^2). \quad (1.45)$$

Az (1.40), (1.41) transzformáció „faktorizálja” a Hamilton-függvényt.

Megemlékezzünk végül a változók még egy fajtájáról, mely ugyancsak hasznosnak bizonyul a dinamikai szimmetriák tárgyalásában. Legyen

$$\left. \begin{aligned} b_\alpha &= \pi_\alpha \cos \frac{p_0 \mathbf{pq}}{mg} + m\omega q_\alpha \sin \frac{p_0 \mathbf{pq}}{mg}, \\ c_\alpha &= q_\alpha \cos \frac{p_0 \mathbf{pq}}{mg} - \frac{\pi_\alpha}{m\omega} \sin \frac{p_0 \mathbf{pq}}{mg}, \end{aligned} \right\} (E < 0) \quad (1.46)$$

ill.

$$\left. \begin{aligned} b_\alpha &= \pi_\alpha \operatorname{ch} \frac{p_0 \mathbf{pq}}{mg} + m\omega q_\alpha \operatorname{sh} \frac{p_0 \mathbf{pq}}{mg}, \\ c_\alpha &= q_\alpha \operatorname{ch} \frac{p_0 \mathbf{pq}}{mg} + \frac{\pi_\alpha}{m\omega} \operatorname{sh} \frac{p_0 \mathbf{pq}}{mg}, \end{aligned} \right\} (E > 0) \quad (1.47)$$

ezek a „Bacry-változók” [51, 53]. Az (1.20), (1.21), (1.33) képletek felhasználásával kapjuk:

$$\frac{dc_\alpha}{dt} = \frac{1}{m} b_\alpha, \quad \frac{db_\alpha}{dt} = \mp m\omega^2 c_\alpha. \quad (1.48)$$

A Bacry-változók mozgásegyenleteit láthatóan a $q_\alpha \rightarrow c_\alpha$, $\pi_\alpha \rightarrow b_\alpha$, $\tau \rightarrow t$ helyettesítéssel nyerhetjük (1.36)-ból; ugyancsak fennállnak az (1.22–30)-ból q_α -nak c_α -val és π_α -nak b_α -val való helyettesítése útján nyert relációk. Mindezen összefüggések természetesen megőrzik alakjukat, ha b_α -t és c_α -t $E < 0$ mellett valós 4×4 -es ortogonális mátrixok, $E > 0$ esetén pedig a Lorentz-transzformációk 4×4 -es mátrixai segítségével négyesvektorként transzformáljuk. A dt idődifferenciál ezen transzformációkkal szemben invariáns. A Bacry-változók oly módon teszik láthatóvá a négydimenziós invariancia-szimmetria létezését, hogy eközben az idő-paraméter szerepében megmarad a t fizikai idő; ugyanakkor a \mathbf{q} , \mathbf{p} primitív dinamikai változók-nak bonyolultabb kifejezései, mint q_α és π_α .

2. A négydimenziós invariancia-szimmetria és a Kepler-egyenlet

A négydimenziós euklideszi tér

$$q_1^2 + q_2^2 + q_3^2 + q_4^2 = a^2 \quad (2.1)$$

gömbjének valamely főköre előállítható a

$$q_\alpha(w) = \kappa_\alpha \cos w + \lambda_\alpha \sin w \quad (0 \leq w < 2\pi) \quad (2.2)$$

paraméteres alakban; itt a κ_α , λ_α rögzített négyesvektorok a hosszúságúak és egymásra merőlegesek:

$$\kappa_\mu \kappa_\mu = \lambda_\mu \lambda_\mu = a^2, \quad \kappa_\mu \lambda_\mu = 0. \quad (2.3)$$

A (2.2) főkört a κ_α , λ_α négyesvektorok helyett jellemezhetjük a

$$\Phi_{\alpha\beta} = \kappa_\alpha \lambda_\beta - \kappa_\beta \lambda_\alpha \quad (2.4)$$

4×4-es másodrendű antiszimmetrikus tenzorral is. Fennáll:

$$\varepsilon_{\alpha\lambda\mu\nu} \varrho_\lambda \Phi_{\mu\nu} = 0, \quad (2.5)$$

$$\varepsilon_{\kappa\lambda\mu\nu} \Phi_{\kappa\lambda} \Phi_{\mu\nu} = 0. \quad (2.6)$$

A $\mathbf{q} (\varrho_1, \varrho_2, \varrho_3)$ vektorok háromdimenziós alterében végrehajtott elforgatásokkor $(\Phi_{23}, \Phi_{31}, \Phi_{12})$ és $(\Phi_{14}, \Phi_{24}, \Phi_{34})$ hármasektorokként viselkednek. Vezessük be ezekre a Λ , ill. Γ jelölést: $\Lambda_i = \frac{1}{2} \varepsilon_{irs} \Phi_{rs}$, $\Gamma_i = \Phi_{i4}$. Ebben a háromdimenziós jelölésben (2.6) helyett

$$\Lambda \Gamma = 0 \quad (2.7)$$

írható, (2.5) pedig a

$$\mathbf{q} \times \Gamma + \sqrt{a^2 - \mathbf{q}^2} \Lambda = 0, \quad (2.8)$$

$$\mathbf{q} \Lambda = 0 \quad (2.9)$$

összefüggéseket szolgáltatja [(2.8) felírásához felhasználtuk (2.1)-et is]. A (2.9) egyenlet azt fejezi ki, hogy a (2.2) kört a \mathbf{q} vektorok háromdimenziós alterére vetítve nyert görbe ott a Λ vektorra merőleges síkban fekszik; (2.8) pedig megadja e görbe egyenletét. A \mathbf{q} -térben a koordinátatengelyeket rendre a $-\Gamma$, $\Gamma \times \Lambda$ és Λ (derékszögű jobbrendszer képező) vektorokkal párhuzamosaknak választva azt találjuk, hogy a (2.8) egyenletnek csupán egyetlen komponense nem tűnik el azonosan, s az ezt az egyenletet az

$$\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} = 1 \quad (2.10)$$

alakban szolgáltatja [itt $b^2 = a^2/(1 + \Gamma^2/\Lambda^2)$; x és y a \mathbf{q} vektor első két komponensét jelöli, a harmadik komponens (1.9) folytán azonosan eltűnik].

Tetszőleges négydimenziós elforgatás, melyet a $\kappa_\alpha, \lambda_\alpha$ négyesvektorokra [s így a (2.2) főkörre és a (2.4) antiszimmetrikus tenzorra] alkalmazunk, a (2.10) ellipszist ugyancsak a fél-nagy tengellyel rendelkező ellipszissé transzformálja. Megfordítva, bármely ellipszist, melynek fél-nagy tengelye a -val egyenlő és centruma a \mathbf{q} -tér kezdőpontja, a (2.1) négydimenziós térbeli gömb alkalmas főkörének — amely természetesen (2.2)-ből négydimenziós elforgatással nyerhető — a \mathbf{q} -térre való vetítése útján származtathatunk. Éppen ezek az adott a fél-nagy tengellyel rendelkező ellipszisek képezik az energia adott negatív értékéhez tartozó Kepler-pályák („izoberg”) seregét. Ily módon valamely (2.10) ellipszispályán végbemenő Kepler-mozgásnak megfeleltethető a (2.1) fiktív négydimenziós térbeli gömbfelület egy főkörén végbemenő mozgás. Lényegében ilyen megfeleltetést alkalmazott Kepler — anélkül természetesen, hogy négydimenziós tér használatához folyamodott volna — híres időegyenletének levezetésében.

Rendeljük a w paraméter 0 értékét a (2.2) kör azon pontjához, amelyben $\varrho_\alpha(w)$ negyedik komponense zérus: $\varrho_4(0) = 0$; ekkor $\kappa_4 = 0$ és $\Gamma = \kappa \lambda_4$. Feltehetjük, hogy $\lambda_4 < 0$; ekkor a választott koordinátarendszerben a κ_α -t jellemző komponensek: $\kappa_\alpha (a, 0, 0, 0)$. Azonfelül λ_α -nak csak a második és negyedik komponense különbözhet zérustól; így az a 2—4 síkban végrehajtott elforgatással átvihető a $\lambda'_\alpha(0, a, 0, 0)$ vektorba. Ez a (2.2) kört a (2.10) ellipszissel egy síkban fekvő

$$x(w) = a \cos w, \quad y(w) = a \sin w \quad (2.11)$$

körbe transzformálja. Ebből y irányú, b/a arányú zsugorítással nyerhető a (2.10) ellipszis

$$x(w) = a \cos w, \quad y(w) = b \sin w \quad (2.12)$$

paraméteres előállítás. A w excentrikus anomália és a t idő kapcsolatát Kepler időegyenlete fejezi ki. Térjünk át arra a vesszős koordinátarendszerre, melynek kezdőpontja az ellipszis egyik F gyújtópontja (az erőcentrum); a koordinátatengelyek továbbra is legyenek az ellipszis tengelyeivel párhuzamosak. Az új koordináták (2.12) helyett

$$x'(w) = a(\cos w - \varepsilon), \quad y'(w) = b \sin w. \quad (2.13)$$

Az F -re vonatkozó területi sebesség

$$\frac{\pi ab}{T} = \frac{1}{2} \left(x' \frac{dy'}{dt} - y' \frac{dx'}{dt} \right) = \frac{ab}{2} (1 - \varepsilon \cos w) \frac{dw}{dt}; \quad (2.14)$$

itt $T = 2\pi/\omega$ a keringési idő. Kapjuk tehát:

$$\omega = (1 - \varepsilon \cos w) \frac{dw}{dt}; \quad (2.15)$$

az idő szerint integrálva a $t=0$, $w=0$ kezdeti feltétel mellett nyerjük az

$$\omega t = w - \varepsilon \sin w \quad (2.16)$$

Kepler-egyenletet. Az erőcentrumtól mért $q \equiv (x'^2 + y'^2)^{1/2}$ távolság (2.13) alapján így írható:

$$q = a(1 - \varepsilon \cos w); \quad (2.17)$$

itt tekintetbe vettük a b kistengely és az ε numerikus excentricitás $b^2 = a^2(1 - \varepsilon^2)$ kapcsolatát. A (2.15), (2.17) képleteket kombinálva kapjuk:

$$dw = \frac{a}{q} \omega dt. \quad (2.18)$$

A pozitív energiájú hiperbolapályákra vonatkozóan hasonló megfontolásokat végezhetünk. A négydimenziós tér

$$q_1^2 + q_2^2 + q_3^2 - q_0^2 = a^2 \quad (2.19)$$

egyköpenyű forgási hiperboloidjának egyenlete a $q_4 = \frac{1}{i} q_0$ képzetes koordináta bevezetése után (2.1)-gyel azonos alakot ölt:

$$q_1^2 + q_2^2 + q_3^2 + q_4^2 = a^2. \quad (2.20)$$

Legyen κ_α , λ_α két rögzített négyesvektor képzetes negyedik komponensekkel; tegyük fel, hogy fennáll:

$$\kappa_\mu \kappa_\mu = -\lambda_\mu \lambda_\mu = a^2, \quad \kappa_\mu \lambda_\mu = 0. \quad (2.21)$$

Ekkor

$$q_\alpha(w) = \kappa_\alpha \operatorname{ch} w + \lambda_\alpha \operatorname{sh} w \quad (2.22)$$

(w valós paraméter, mely $-\infty$ -tól $+\infty$ -ig fut) egy hiperbola-ágat ír le a (2.19) hiperboloidon. Ez a görbe jellemezhető a

$$\Phi_{\alpha\beta} = \kappa_\alpha \lambda_\beta - \kappa_\beta \lambda_\alpha \quad (2.23)$$

tenzorral is; fennáll:

$$\varepsilon_{\alpha\lambda\mu\nu} \varrho_\lambda \Phi_{\mu\nu} = 0, \quad (2.24)$$

$$\varepsilon_{\kappa\lambda\mu\nu} \Phi_{\kappa\lambda} \Phi_{\mu\nu} = 0 \quad (2.25)$$

[vö. (2.4), (2.5), (2.6)]. A \mathbf{q} ($\varrho_1, \varrho_2, \varrho_3$) vektorok háromdimenziós alterében végrehajtott elforgatásokkor ($\Phi_{23}, \Phi_{31}, \Phi_{12}$) és ($i\Phi_{14}, i\Phi_{24}, i\Phi_{34}$) valós hármisvektorokként viselkednek. Vezessük be ezekre a Λ , ill. Γ jelölést: $A_i = \frac{1}{2} \varepsilon_{irs} \Phi_{rs}$, $\Gamma_j = i\Phi_{j4}$. Ebben a háromdimenziós jelölésben (2.25) helyett

$$\Lambda\Gamma = 0, \quad (2.26)$$

(2.24) helyett pedig

$$\mathbf{q} \times \Gamma + \sqrt{\mathbf{q}^2 - a^2} \Lambda = 0, \quad (2.27)$$

$$\mathbf{q}\Lambda = 0 \quad (2.28)$$

írható [(2.27) felírásához felhasználtuk (2.19)-et is]. A (2.28) egyenlet azt fejezi ki, hogy a (2.22)-t a \mathbf{q} vektorok háromdimenziós alterére vetítve adódó görbe ott a Λ vektorra merőleges síkban fekszik, (2.27) pedig megadja ezen görbe egyenletét. A \mathbf{q} -térben a koordinátatengelyeket rendre a $-\Gamma, \Gamma \times \Lambda, \Lambda$ (derékszögű jobbrandszert képező) vektorokkal párhuzamosaknak választva azt találjuk, hogy a (2.27) egyenletnek csupán egyetlen, nem azonosan eltűnő komponense van, s az ezt az egyenletet négyzetre emelés után az

$$\frac{x^2}{a^2} - \frac{y^2}{b^2} = 1 \quad (2.29)$$

alakban szolgáltatja [itt $b^2 = a^2 / \{(\Gamma/\Lambda)^2 - 1\}$; x és y a \mathbf{q} vektor első két komponensét jelöli, a harmadik komponens (2.28) folytán azonosan zérus]. Megjegyezzük, hogy (2.24), (2.27), (2.29) a (2.22) hiperbola-ággal együtt leírja a másik $\varrho_\alpha(w) = -\kappa_\alpha \operatorname{ch} w + \lambda_\alpha \operatorname{sh} w$ ágat is, mely ugyanolyan erősségű taszítóerőnek felel meg.

Tetszőleges Lorentz-transzformáció, melyet a $\kappa_\alpha, \lambda_\alpha$ négyesvektorokra [s így (2.22)-re és (2.23)-ra] alkalmazunk, a (2.29) hiperbolát ugyancsak a valós tengellyel rendelkező hiperbolába transzformálja. Megfordítva, bármely hiperbolát, melynek valós tengelye a -val egyenlő és centruma a \mathbf{q} -tér kezdőpontja, a (2.19) hiperboloidon haladó (2.22) alakú alkalmas hiperbolából a \mathbf{q} -térre való vetítéssel származtathatunk [a (2.22) hiperbolák egymásból Lorentz-transzformáció segítségével nyerhetők]. Az adott a valós tengellyel rendelkező hiperbola-ágak képezik az erőcentrumtól mért távolság reciprokával arányos potenciál mellett az energia adott pozitív értékéhez tartozó — izoerg — pályák seregét. Ily módon valamely (2.29) hiperbola-pályán a Newton, ill. Coulomb-potenciál hatása alatt végbemenő mozgásnak megfeleltethető a (2.19) fiktív négydimenziós térbeli hiperboloidból kimetszett (2.22) alakú hiperbolán végbemenő mozgás. Ezt a megfeleltetést felhasználhatjuk a Kepler-egyenlet pozitív energiás analogonjának leszámaztatásához.

A (2.22) hiperbola-ág a $k_\alpha = (\kappa_\sigma \kappa_\sigma)^{-\frac{1}{2}} \kappa_\alpha$, $l_\alpha = (-\lambda_\sigma \lambda_\sigma)^{-\frac{1}{2}} \lambda_\alpha$ ortonormált vektorok rendszerében az

$$x(w) = a \operatorname{ch} w, \quad y(w) = a \operatorname{sh} w \quad (2.30)$$

paraméteres alakban írható le. Az xy Descartes-rendszerben (2.30) egyenlőszárú hiperbola-ágot ír le. A (2.29) hiperbola jobb ága ebből az ordináták b/a -val való szorzása (zsugorítás vagy nyújtás) útján nyerhető:

$$x(w) = a \operatorname{ch} w, \quad y(w) = b \operatorname{sh} w. \quad (2.31)$$

A jobb gyújtópontot (a vonzó erőter centrumát) kezdőpontnak választva írhatjuk:

$$x'(w) = a (\operatorname{ch} w - \varepsilon), \quad y'(w) = b \operatorname{sh} w. \quad (2.32)$$

Keringési időre most nem hivatkozhatunk; az impulzusmomentum megmaradásának tételét jegyezzük fel:

$$p_0 b = m \left(x' \frac{dy'}{dt} - y' \frac{dx'}{dt} \right) = mab(1 - \varepsilon \operatorname{ch} w) \frac{dw}{dt}. \quad (2.33)$$

Kapjuk tehát:

$$\omega = (1 - \varepsilon \operatorname{ch} w) \frac{dw}{dt}; \quad (2.34)$$

a Kepler-egyenlet pozitív energiás analogonját innen az idő szerint integrálva nyerjük, a $t=0$, $w=0$ kezdeti feltétel mellett:

$$\omega t = w - \varepsilon \operatorname{sh} w. \quad (2.35)$$

A $q = (x'^2 + y'^2)^{\frac{1}{2}}$ távolság az erőcentrumtól (2.31) alapján:

$$q = a (\varepsilon \operatorname{ch} w - 1); \quad (2.36)$$

itt tekintetbe vettük a $b^2 = a^2(\varepsilon^2 - 1)$ relációt. A (2.34), (2.36) képleteket kombinálva kapjuk:

$$dw = -\frac{a}{q} \omega dt. \quad (2.37)$$

A (2.18), (1.37) egyenleteket (1.35)-tel összehasonlítva látjuk, hogy

$$dw = \omega d\tau; \quad (2.38)$$

a τ időparaméter célszerűen arányosnak választható w -vel.

Megjegyezendő, hogy kifejezhetjük dw (ill. $d\tau$) kapcsolatát dt -vel az erőcentrumtól mért q távolság helyett a $p = m[(dx'/dt)^2 + (dy'/dt)^2]^{\frac{1}{2}}$ impulzus segítségével is. A (2.13), (2.15), (2.32), (2.34) képleteket felhasználva kapjuk:

$$d\tau = \frac{p_0^2 \pm p^2}{2p_0^2} dt \quad (2.39)$$

($p_0 = m\omega a$).

Jelölje a (2.2), ill. (2.22) képletekkel megadott q_α négyesvektor τ szerint képezett deriváltja m -szeresét π_α ; ekkor q_α -ra és π_α -ra fennállnak az (1.36) mozgásegyenletek. Teljesül (1.23) is; fennáll azonkívül (2.5)-tel és (2.24)-gyel analógiában:

$$\varepsilon_{\alpha\lambda\mu\nu} \pi_\lambda \Phi_{\mu\nu} = 0, \quad (2.40)$$

vagy részletesebben

$$\pi \times \Gamma + \sqrt{p_0^2 \mp \pi^2} \Lambda = 0, \quad (2.41)$$

$$\pi \Lambda = 0. \quad (2.42)$$

Ezek szerint π a kötött Kepler-mozgás esetében (2.10)-hez hasonló ellipszisen, pozitív energia mellett pedig hiperbolán mozog; ez utóbbinak valós és képzetes tengelye a (2.29) hiperbola képzetes, ill. valós tengelyével arányos. Érdekesebb a \mathbf{p} impulzus (ill. a $\mathbf{v} = \mathbf{p}/m$ sebesség) által leírt görbe. Ennek egyenletét oly módon kaphatjuk meg, hogy (2.41)-be π -vel kifejezett alakját írjuk be [π a \mathbf{p} impulzusnak $dt/d\tau = 2p_0^2/(p_0^2 \pm p^2)$ -szerese; lásd (2.39)]. Kört kapunk, melynek sugara és centrumának helye excentricitás-függő; az ellipszispálya kistengelyének végpontjaiban, és a hiperbolapálya végtelen távoli pontjaiban, az impulzus p_0 , azaz független az excentricitástól.

Adott negatív energia mellett a \mathbf{p} vektor által leírt körök a $\pi_\lambda \pi_\lambda = p_0^2$ négydimenziós térbeli gömb főköréből a

$$\pi = \frac{2p_0^2}{p_0^2 + p^2} \mathbf{p}, \quad \pi_4 = \frac{p_0^2 - p^2}{p_0^2 + p^2} p_0$$

sztereografikus projekció útján állnak elő [\mathbf{p} helyett az (1.40) skálatranszformációval nyert \mathbf{y} -t használva mondhatjuk, hogy az \mathbf{y} által leírt körök a $\xi_\lambda \xi_\lambda = 1$ egységgömb főköréből a

$$\xi = \frac{2}{1+y^2} \mathbf{y}, \quad \xi_4 = \frac{1-y^2}{1+y^2}$$

sztereografikus projekcióval adódnak]. A főkörökre négydimenziós elforgatásokat alkalmazva a \mathbf{p} (ill. \mathbf{y}) által leírt görbék (körök) izoerg seregét kapjuk. Pozitív energia mellett is elvégezhetők e megfontolások.

Míg az 1. fejezetben a megszokott háromdimenziós térbeli változókból szerkesztettünk olyan mennyiségeket, amelyek segítették felismerni és maradéktalanul megragadni a négydimenziós invariancia-szimmetriát, ebben a fejezetben azt láttuk, hogy négydimenziós geometriai megfontolásokból kiindulva miként kapható meg maradéktalanul a szokásos leírás.

3. A mozgásegyenletek Hamilton-féle alakja; általánosított kanonikus transzformációk

Az (1.31), (1.32) Newton-egyenletek természetesen felírhatók a Hamilton-féle kanonikus alakban:*

$$\frac{dr^A}{dt} = \varepsilon^{AB} \frac{\partial H}{\partial r^B}, \quad (3.1)$$

ahol

$$r^i \equiv q_i, \quad r^{3+i} \equiv p_i,$$

* A latin nagybetűvel jelölt indexek az 1, 2, 3, 4, 5, 6 értékeket veszik fel.

és

$$(\varepsilon^{AB}) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.2)$$

Értelmezzük a $\Phi(r^A)$, $\Psi(r^A)$ függvények $(\Phi, \Psi)_r$ Poisson-féle zárójeles kifejezését a

$$(\Phi, \Psi)_r \equiv \varepsilon^{AB} \frac{\partial \Phi}{\partial r^A} \frac{\partial \Psi}{\partial r^B} \quad (3.3)$$

képlettel. A (3.1) mozgásegyenletek felírhatók a

$$\frac{dr^A}{dt} = (r^A, H)_r \quad (3.4)$$

alakban is. Az r^A változók tetszőleges $\Phi(r^A)$ függvényére hasonló alakú mozgásegyenlet igaz:

$$\frac{d\Phi}{dt} = (\Phi, H)_r. \quad (3.5)$$

Vezessük be új változókként az (1.40), (1.41) képletekkel értelmezett $z^i \equiv x_i$, $z^{3+i} \equiv y_i$ mennyiségeket. Ezek (3.5) szerint a

$$\frac{dz^A}{dt} = (z^A, H)_r, \quad (3.6)$$

vagy másképpen, a

$$\frac{dz^A}{dt} = \eta^{AB} \frac{\partial H}{\partial z^B} \quad (3.7)$$

mozgásegyenleteknek tesznek eleget, ahol

$$\eta^{AB} = (z^A, z^B)_r; \quad (3.8)$$

(3.7)-be természetesen H -nak a z^A változókkal kifejezett (1.44), (1.45) alakját kell behelyettesíteni. A (3.8), valamint az (1.1), (1.2), (1.40), (1.41) képletek felhasználásával kapjuk:

$$(\eta^{AB}) = \begin{pmatrix} \pm(x_i y_j - x_j y_i) & \delta_{ij} - \frac{1}{2}(1 \pm y^2) \frac{x_i x_j}{x^2} \mp y_i y_j \\ -\delta_{ij} + \frac{1}{2}(1 \pm y^2) \frac{x_i x_j}{x^2} \mp y_i y_j & -\frac{1}{2} \frac{1 \pm y^2}{x^2} (x_i y_j - x_j y_i) \end{pmatrix}. \quad (3.9)$$

Mint hogy $\eta^{AB} \neq \varepsilon^{AB}$, a (3.7) mozgásegyenletek nem kanonikus alakúak; az (1.40), (1.41) transzformáció nem kanonikus transzformáció.

Az (1.44), (1.45), (3.9) képletek felhasználásával kapjuk:

$$\eta^{AB} \frac{\partial H}{\partial z^B} = \frac{1}{2} (1 \pm y^2) \varepsilon^{AB} \frac{\partial H}{\partial z^B} \quad (3.10)$$

vagy

$$\eta^{AB} \frac{\partial H}{\partial z^B} = \frac{N}{x} \varepsilon^{AB} \frac{\partial H}{\partial z^B}. \quad (3.11)$$

Minthogy (1.40), (1.41), (1.45), valamint (1.2) szerint $N/x = \pm a/q$, az (1.35) képletet tekintetbe véve (3.11) helyett írható:

$$\eta^{AB} \frac{\partial H}{\partial z^B} = \frac{d\tau}{dt} \varepsilon^{AB} \frac{\partial H}{\partial z^B}. \quad (3.12)$$

A (3.7) és (3.12) képletek összehasonlítása mutatja: ha bevezetjük t helyett az (1.35) összefüggést teljesítő τ „idő”-paramétert, a z^A változók mozgásegyenletei kanonikus alakot öltenek.

Említettük, hogy az áttérés az r^A változókról a z^A változókra nem kanonikus transzformáció: a $(z^A, z^B)_r$ Poisson-féle zárójeles kifejezés értéke nem egyenlő $(r^A, r^B)_r$ értékével, és a z^A változókra mint t függvényeire érvényes mozgásegyenletek nem kanonikus alakúak. A kanonikus alakot oly módon nyertük vissza, hogy t helyett új τ „idő”-paramétert vezettünk be.

Hasznos ezért a megszokott kanonikus transzformációknál általánosabb transzformációkat tekintetbe venni. Értelmezzük az r^a nyolckomponensű mennyiséget a következőképpen:*

$$r^i \equiv q_i, \quad r^4 \equiv t, \quad r^{4+i} \equiv p_i, \quad r^8 \equiv -H. \quad (3.13)$$

A q_i, p_i dinamikai változókkal egyenrangú változókként vesszük tekintetbe a t időt és a Hamilton-függvény H számértékét (az energiát). Az r^A változókat a hatdimenziós fázistér pontjai szemléltetik. Az r^a mennyiségek szemléltetésére a nyolcdimenziós *kibővített fázistér* szolgál (lásd pl. [59, 60]).

Bevezetjük a kibővített fázistérben értelmezett $\varphi(r^a)$, $\psi(r^a)$ függvények kibővített Poisson-féle zárójeles kifejezését a

$$(\varphi, \psi)_r \equiv \varepsilon^{ab} \frac{\partial \varphi}{\partial r^a} \frac{\partial \psi}{\partial r^b} \quad (3.14)$$

definícióval; itt $\varepsilon^{ab} = 1$, ha $b - a = 4$; $= -1$, ha $a - b = 4$; végül $= 0$, ha $|a - b| \neq 4$ [vö. (3.2)].

A kibővített fázistér $\bar{r}^a = \bar{r}^a(r^b)$ önmagára való leképezésének neve: *kibővített kanonikus transzformáció*, ha teljesül az

$$(\bar{r}^a, \bar{r}^b)_r = \varepsilon^{ab} \quad (3.15)$$

feltétel.

Az

$$\bar{r}^a = r^a + (r^a, \varphi)_r + \frac{1}{2} ((r^a, \varphi)_r, \varphi)_r + \frac{1}{3!} (((r^a, \varphi)_r, \varphi)_r, \varphi)_r + \dots \quad (3.16)$$

* A kis gót betűkkel jelölt indexek az 1-től 8-ig terjedő egész értékeket veszik fel.

képlet, ahol $\varphi = \varphi(\mathbf{r}^a)$ a kibővített fázistér pontjaiban értelmezett függvény, kibővített kanonikus transzformációt határoz meg. Fennáll ugyanis:

$$(\mathbf{r}^a, \mathbf{r}^b)_r = \varepsilon^{ab}; \quad (3.17)$$

$$\left. \begin{aligned} & (\mathbf{r}^a, (\mathbf{r}^b, \varphi)_r)_r + ((\mathbf{r}^a, \varphi)_r, \mathbf{r}^b)_r = ((\mathbf{r}^a, \mathbf{r}^b)_r, \varphi)_r, \\ & \frac{1}{2} (\mathbf{r}^a, ((\mathbf{r}^b, \varphi)_r, \varphi)_r)_r + ((\mathbf{r}^a, \varphi)_r, (\mathbf{r}^b, \varphi)_r)_r + \frac{1}{2} (((\mathbf{r}^a, \varphi)_r, \varphi)_r, \mathbf{r}^b)_r = \\ & \quad = \frac{1}{2} (((\mathbf{r}^a, \mathbf{r}^b)_r, \varphi)_r, \varphi)_r, \\ & \frac{1}{3!} (\mathbf{r}^a, (((\mathbf{r}^b, \varphi)_r, \varphi)_r, \varphi)_r)_r + \frac{1}{2} ((\mathbf{r}^a, \varphi)_r, ((\mathbf{r}^b, \varphi)_r, \varphi)_r)_r + \\ & \quad + \frac{1}{2} (((\mathbf{r}^b, \varphi)_r, \varphi)_r, (\mathbf{r}^a, \varphi)_r)_r + \frac{1}{3!} ((((\mathbf{r}^a, \varphi)_r, \varphi)_r, \varphi)_r, \mathbf{r}^b)_r = \\ & \quad = \frac{1}{3!} (((((\mathbf{r}^a, \mathbf{r}^b)_r, \varphi)_r, \varphi)_r, \varphi)_r, \varphi)_r, \end{aligned} \right\} \quad (3.18)$$

s. i. t. [a (3.18) összefüggések közül az első az $\mathbf{r}^a, \mathbf{r}^b, \varphi$ függvényekre alkalmazott Jacobi-azonosság, a többi pedig a Jacobi-azonosság ismételt alkalmazásával áll elő]; a (3.15) feltétel teljesülése következik a (3.17), (3.18) összefüggésekből.

Adott dinamikai probléma esetében a (3.13) mennyiségek közül H kifejezhető a többi segítségével; általánosabban ez a kapcsolat implicit alakban is felírható:

$$\omega(\mathbf{r}^a) = 0. \quad (3.19)$$

Az adott problémának megfelelő \mathbf{r}^a pontok a nyolcdimenziós kibővített fázistér egy hétdimenziós hiperfelületén, az energiefelületen fekszenek.

Képezzünk kibővített kanonikus transzformációt (3.16) szerint az $u \cdot \omega(\mathbf{r}^a)$ függvény segítségével, ahol u független \mathbf{r}^a -tól.

Megváltoztatjuk a jelölést: az eredeti dinamikai változókat \mathbf{r}^a helyett \mathbf{r}_0^a -lal jelöljük, a transzformált $\bar{\mathbf{r}}^a$ helyett $\mathbf{r}^a = \mathbf{r}^a(u)$ -t írunk; \mathbf{r}^a -t ekkor az

$$\mathbf{r}^a = \mathbf{r}_0^a + (\mathbf{r}_0^a, \omega)_{r_0} u + \frac{1}{2} ((\mathbf{r}_0^a, \omega)_{r_0}, \omega)_{r_0} u^2 + \frac{1}{3!} (((\mathbf{r}_0^a, \omega)_{r_0}, \omega)_{r_0}, \omega)_{r_0} u^3 + \dots \quad (3.20)$$

sor állítja elő. Deriváljuk \mathbf{r}^a -t u szerint:

$$\frac{d\mathbf{r}^a}{du} = (\mathbf{r}^a, \omega)_{r_0} = \varepsilon^{pa} \frac{\partial \mathbf{r}^a}{\partial \mathbf{r}_0^p} \frac{\partial \omega}{\partial \mathbf{r}_0^a} = \varepsilon^{pa} \frac{\partial \mathbf{r}^a}{\partial \mathbf{r}_0^p} \frac{\partial \mathbf{r}^b}{\partial \mathbf{r}_0^a} \frac{\partial \omega}{\partial \mathbf{r}^b} = (\mathbf{r}^a, \mathbf{r}^b)_{r_0} \frac{\partial \omega}{\partial \mathbf{r}^b}. \quad (3.21)$$

Az $\mathbf{r}_0^a \rightarrow \mathbf{r}^a$ leképezés kibővített kanonikus transzformáció, így tehát (3.15) értelmében $(\mathbf{r}^a, \mathbf{r}^b)_{r_0} = \varepsilon^{ab}$. Az $\mathbf{r}^a(u)$ függvény eszerint a

$$\frac{d\mathbf{r}^a}{du} = \varepsilon^{ab} \frac{\partial \omega}{\partial \mathbf{r}^b}, \quad (3.22)$$

vagy másképpen, a

$$\frac{dr^a}{du} = (r^a, \omega)_r \quad (3.23)$$

kanonikus alakú differenciálegyenlet-rendszernek tesz eleget. Az r^a változók tetszőleges $\varphi(r^a)$ függvényére hasonló alakú differenciálegyenlet-rendszer igaz:

$$\frac{d\varphi}{du} = (\varphi, \omega)_r. \quad (3.24)$$

Ebből következik, hogy $\frac{d\omega}{du}$ zérus, $\omega(r^a)$ független u -tól:

$$\omega(r_0^a) = \omega(r^a). \quad (3.25)$$

A (3.20) kibővített kanonikus transzformáció a (3.19) energiafelületet önmagára képezi le.

Írjuk fel H és a többi dinamikai változó kapcsolatát a megszokott $H = h(q_i, p_i, t)$ alakban,* az $\omega(r^a)$ függvény ennek megfelelően így választandó [vö. (3.13)]:

$$\omega(r^a) = r^8 + h(r^1, r^2, \dots, r^7). \quad (3.26)$$

Képezzük ennek felhasználásával a (3.22) egyenleteket; (3.13) figyelembe vételével írható:

$$\frac{dq_i}{du} = \frac{\partial h}{\partial p_i}, \quad \frac{dt}{du} = 1, \quad \frac{dp_i}{du} = -\frac{\partial h}{\partial q_i}, \quad \frac{dH}{du} = \frac{\partial h}{\partial t}. \quad (3.27)$$

A második egyenlet szerint $t = u + \text{const.}$; a konstans célszerűen zérusnak választható. Az első és a harmadik egyenlet így a $q_i(t), p_i(t)$ függvényeket meghatározó Hamilton-féle kanonikus mozgásegyenletek. Végül a negyedik egyenlet szerint H változása az időben kizárólag h explicit időfüggésétől eredhet. Az ω segítségével képezett kibővített kanonikus transzformációk eszerint a mozgás lefolyását írják le; az ω függvény (3.26) speciális alakja mellett a transzformáció u paramétere a t idővel egyenlőnek választható.

A mozgás előállítása csak az egyik alkalmazása a kibővített kanonikus transzformációknak. Segítségükkel megfogalmazható a kapcsolat adott mozgás különféle leírásai, adott dinamikai rendszer különböző mozgásállapotai stb. között.

Egy példaként képezzünk a $\varphi(r^a) = \mathbf{qp} \ln \sqrt{\mp 2mH}$ függvény felhasználásával a (3.16) képlet szerint kibővített kanonikus transzformációt. A transzformált változók jele most \bar{r}^a helyett \mathfrak{z}^a lesz; részletesen:

$$\mathfrak{z}^i \equiv x_i, \quad \mathfrak{z}^4 \equiv \tau, \quad \mathfrak{z}^{4+i} \equiv y_i, \quad \mathfrak{z}^8 \equiv -\bar{H}. \quad (3.28)$$

A

$$\mathfrak{z}^a = r^a + (r^a, \mathbf{qp} \ln \sqrt{\mp 2mH})_r + \frac{1}{2} ((r^a, \mathbf{qp} \ln \sqrt{\mp 2mH})_r, \mathbf{qp} \ln \sqrt{\mp 2mH})_r + \dots \quad (3.29)$$

* A kibővített fázistér használata esetén szükséges, hogy a Hamilton-függvény értékét (függő változóját) és függvényszimbólumát eltérő jelöléssel egymástól megkülönböztessük. A közönséges fázistér használata mellett általában szükségtelen ez a megkülönböztetés; a jelen értekezésben is a kibővített fázistér bevezetését megelőzően a Hamilton-függvény értékét és szimbólumát egyaránt H -val jelöltük [vö. pl. (3.1)].

képlet x_i , y_i , τ és \bar{H} számára a következő kifejezéseket szolgáltatja:

$$x_i = q_i \left[1 + \ln \sqrt{\mp 2mH} + \frac{1}{2} (\ln \sqrt{\mp 2mH})^2 + \dots \right] = q_i \sqrt{\mp 2mH}, \quad (3.30)$$

$$y_i = p_i \left[1 - \ln \sqrt{\mp 2mH} + \frac{1}{2} (\ln \sqrt{\mp 2mH})^2 - \dots \right] = p_i / \sqrt{\mp 2mH}, \quad (3.31)$$

$$\tau = t - \frac{q\mathbf{p}}{2H}, \quad (3.32)$$

$$\bar{H} = H. \quad (3.33)$$

A (3.30), (3.31) transzformációs képletek megegyeznek (1.41)-gyel, ill. (1.40)-nel. Differenciáljuk (3.32) mindkét oldalát t szerint; H -nak, valamint a $\dot{\mathbf{q}}$, $\dot{\mathbf{p}}$ időderiváltaknak (1.1), (1.31), (1.32) kifejezését behelyettesítve azt találjuk, hogy a $-g/q$ potenciál esetében τ elegendő tesz (1.35)-nek. Kibővített kanonikus transzformációnk éppen olyan időváltozót vezet be, amilyenre (1.36) alatt volt szükségünk; (3.33) szerint H invariáns.

Mindez összhangban van a (3.7), (3.12) képletekhez fűzött megállapításunkkal: a q_i , p_i változókról áttérve x_i -re és y_i -re, a mozgásegyenletek újra kanonikus alakot öltenek, hacsak t helyett új időváltozóként τ -t vezetjük be.

Ugyancsak leírható kibővített kanonikus transzformáció segítségével a négydimenziós rotátor $\bar{\tau}$ idő-paraméterének bevezetése, melyről a 172. oldalon tettünk említést. Legyen

$$\bar{\tau} = \pm \left(\frac{2}{g} \right)^2 H^2 \tau, \quad (3.34)$$

$$\bar{H} = \mp \left(\frac{g}{2} \right)^2 H^{-1}; \quad (3.35)$$

könnyű belátni, hogy

$$(\bar{\tau}, -\bar{H})_3 = 1. \quad (3.36)$$

A kibővített kanonikus transzformáció (3.15) feltétele teljesül.

A kibővített kanonikus transzformációk, melyek a megszokott kanonikus transzformációk általánosítását képezik, felfedik *ad hoc* megállapításaink hátterét és általános keretbe foglalják őket.

* * *

Ugyancsak szükségessé válik a megszokott kanonikus formalizmus általánosítása, ha a koordinátákra és impulzusokra bizonyos azonosságok (mellékfeltételek) teljesülnek. Ilyen változók voltak π_α , q_α , melyekre az (1.26), (1.27) azonosságok teljesültek, az azonos alakú feltételeket kielégítő c_α , b_α változók, valamint ξ_α és η_α amelyekre az (1.38), (1.39) mellékfeltételek teljesültek.

Először hasonlítsuk össze az \mathbf{x} , \mathbf{y} , valamint a q_α , π_α változók segítségével megadott leírást. A $z^i \equiv x_i$, $z^{3+i} \equiv y_i$ változók mozgásegyenletei a τ idő-paraméter használata mellett (3.7), (3.12) szerint felírhatók a Hamilton-féle kanonikus alakban:

$$\frac{dz^A}{d\tau} = e^{AB} \frac{\partial H}{\partial z^B}; \quad (3.37)$$

ide H -nak a z^A változókkal kifejezett (1.44), (1.45) alakját kell behelyettesíteni. Értelmezzük a $\Phi(z^A)$, $\Psi(z^A)$ függvények $(\Phi, \Psi)_z$ Poisson-féle zárójeles kifejezését a

$$(\Phi, \Psi)_z \equiv \varepsilon^{AB} \frac{\partial \Phi}{\partial z^A} \frac{\partial \Psi}{\partial z^B} \quad (3.38)$$

képlettel. A (3.37) mozgásegyenletek a

$$\frac{dz^A}{d\tau} = (z^A, H)_z \quad (3.39)$$

alakban is felírhatók; a z^A változók tetszőleges $\Phi(z^A)$ függvényére hasonló alakú mozgásegyenlet igaz:

$$\frac{d\Phi}{d\tau} = (\Phi, H)_z. \quad (3.40)$$

A q_α, π_α négydimenziós változók a következőképpen fejezhetők ki x -szel és y -nal:

$$q = \pm (mg)^{-1} N \left[\frac{1}{2} (1 \pm y^2) x \mp (xy) y \right], \quad q_4 = -(\pm)^{-1} (mg)^{-1} N xy; \quad (3.41)$$

$$\pi = \pm mg N^{-2} xy, \quad \pi_4 = (\pm)^{\frac{1}{2}} mg N^{-2} \frac{1}{2} x(1 \pm y^2); \quad (3.42)$$

N -et (1.45) adja meg. A (3.41), (3.42) kifejezéseket (3.40)-be helyettesítve az (1.36) mozgásegyenleteket kapjuk.

Közvetlenül q_α, π_α segítségével is megfogalmazhatjuk a problémát, mellőzve az x, y változókat. Vezessük be a tömörebb σ^a jelölést: $\sigma^x \equiv q_x, \sigma^{4+x} \equiv \pi_x$; az $F(\sigma^a)$, $G(\sigma^a)$ függvények Poisson-féle zárójeles kifejezését a (3.38) minta szerint képezve kapjuk:

$$\varepsilon^{AB} \frac{\partial F}{\partial z^A} \frac{\partial G}{\partial z^B} = \kappa^{ab} \frac{\partial F}{\partial \sigma^a} \frac{\partial G}{\partial \sigma^b}, \quad (3.43)$$

ahol

$$\kappa^{ab} = (\sigma^a, \sigma^b)_z. \quad (3.44)$$

A jobb oldalon álló Poisson-féle zárójeles kifejezések részletes alakja:

$$\left. \begin{aligned} (q_\alpha, q_\beta)_z &= -\frac{2}{\pi_\lambda \pi_\lambda} M_{\alpha\beta}, \\ (q_\alpha, \pi_\beta)_z &= \delta_{\alpha\beta} + \frac{q_\alpha q_\beta}{q_\lambda q_\lambda} - 2 \frac{\pi_\alpha \pi_\beta}{\pi_\lambda \pi_\lambda}, \\ (\pi_\alpha, \pi_\beta)_z &= \frac{1}{q_\lambda q_\lambda} M_{\alpha\beta}. \end{aligned} \right\} \quad (3.45)$$

A (3.43) kifejezést az $(F, G)_\sigma^*$ szimbólummal is fogjuk jelölni:

$$(F, G)_\sigma^* \equiv \kappa^{ab} \frac{\partial F}{\partial \sigma^a} \frac{\partial G}{\partial \sigma^b}. \quad (3.46)$$

Látható, hogy az \mathbf{x}, \mathbf{y} változóktól megszabadultunk. Az F és G függvények σ^a szerint képezett deriváltjaiból (3.46) a Poisson-féle zárójeles kifejezéshez bizonyos mértékig hasonlóan épül fel; mindamellett (ezt kívánja a csillag jelezni) itt a Poisson-féle zárójeles kifejezés egy általánosításával állunk szemben: a speciális ε^{ab} helyét az általánosabb alakú κ^{ab} foglalja el. Az (1.36) mozgásegyenletek felírhatók a

$$\frac{d\sigma^a}{d\tau} = \kappa^{ab} \frac{\partial H}{\partial \sigma^b} \quad (3.47)$$

vagy a

$$\frac{d\sigma^a}{d\tau} = (\sigma^a, H)_\sigma^* \quad (3.48)$$

alakban; ide H -nak a σ^a változókkal kifejezett (1.9), (1.28) alakját kell behelyettesítenünk.

A (3.46) zárójeles kifejezés jellemző sajátága, hogy az (1.26), (1.27) alatt a bal oldalon álló

$$\theta_I = \frac{\pi_\lambda \pi_\lambda}{m} \mp \frac{g}{(\varrho_\lambda \varrho_\lambda)^{\frac{1}{2}}}, \quad (3.49)$$

$$\theta_{II} = \varrho_\lambda \pi_\lambda \quad (3.50)$$

függvényeknek tetszőleges $F(\sigma^a)$ függvénnyel képezett $(F, \theta_I)_\sigma^*$ zárójeles kifejezése eltűnik σ^a azon értékeire, amelyekre (1.26) és (1.27) teljesül.* Ez a tulajdonsága (3.46)-ot megkülönbözteti az

$$(F, G)_\sigma \equiv \varepsilon^{ab} \frac{\partial F}{\partial \sigma^a} \frac{\partial G}{\partial \sigma^b} \quad (3.51)$$

Poisson-zárójeltől.

Ha az (1.26), (1.27) feltételeket teljesítő σ^a változókat a $(\cdot)_\sigma^*$ zárójeles kifejezés segítségével képezzük

$$\bar{\sigma}^a = \sigma^a + (\sigma^a, F)_\sigma^* + \frac{1}{2} ((\sigma^a, F)_\sigma^*, F)_\sigma^* + \frac{1}{3!} (((\sigma^a, F)_\sigma^*, F)_\sigma^*, F)_\sigma^* + \dots \quad (3.52)$$

transzformációnak vetjük alá, ahol $F(\sigma^a)$ tetszőleges függvény, úgy a $\bar{\sigma}^a$ új változókra (1.26), (1.27) ugyancsak teljesül. Ezzel szemben a (3.51) Poisson-zárójel útján generált

$$\bar{\sigma}^a = \sigma^a + (\sigma^a, F)_\sigma + \frac{1}{2} ((\sigma^a, F)_\sigma, F)_\sigma + \frac{1}{3!} (((\sigma^a, F)_\sigma, F)_\sigma, F)_\sigma + \dots \quad (3.53)$$

kanonikus transzformációk általában nem őrzik meg az (1.26), (1.27) mellékfeltételeket. Megjegyezzük, hogy az (1.26), (1.27) feltételeket teljesítő σ^a változók (3.52) transzformációi a z^A változók

$$\bar{z}^A = z^A + (z^A, f)_z + \frac{1}{2} ((z^A, f)_z, f)_z + \frac{1}{3!} (((z^A, f)_z, f)_z, f)_z + \dots \quad (3.54)$$

kanonikus transzformációinak csoportjával izomorf csoportot alkotnak.

* A görög nagybetűvel jelölt indexek az I, II értékeket veszik fel.

A (3.46) zárójeles kifejezést a z^A változók segítségével definiáltuk, használhatjuk azonban Dirac képletét is [61, 62]:

$$(F, G)_\sigma^* = (F, G)_\sigma - (F, \theta_r)_\sigma I_{rA}(\theta_A, G)_\sigma; \quad (3.55)$$

(I_{rA}) a θ_r függvényekből képezett Poisson-féle zárójeles kifejezések mátrixának az inverze:

$$I_{r\Sigma}(\theta_\Sigma, \theta_A) = \delta_{rA}. \quad (3.56)$$

Az irodalomban (3.55) neve: Dirac-féle zárójeles kifejezés.

Hasonló módon fogalmazható meg az $r^i \equiv q_i$, $r^{3+i} \equiv p_i$, valamint az $a^\alpha \equiv b_\alpha$, $a^{4+\alpha} \equiv c_\alpha$ változók segítségével megadott leírás kapcsolata. Az utóbbiak (1.1), (1.2), (1.20), (1.21), (1.46), (1.47) alapján az előbbiekkal kifejezhetők. Az a^α változók mozgásegyenletei felírhatók a

$$\frac{da^\alpha}{dt} = (a^\alpha, H)_r \quad (3.57)$$

alakban; ide H -nak az r^A változókkal kifejezett (1.1) alakját kell behelyettesítenünk. Írható (3.57) helyett

$$\frac{da^\alpha}{dt} = \lambda^{ab} \frac{\partial H}{\partial a^b} \quad (3.58)$$

is, ahol

$$\lambda^{ab} = (a^\alpha, a^b)_r; \quad (3.59)$$

(3.58)-ba H (1.9) alakját kell behelyettesítenünk, ahol $M_{\alpha\lambda} = c_\alpha b_\lambda - c_\lambda b_\alpha$. A (3.59) Poisson-féle zárójeles kifejezések részletes alakja:

$$\left. \begin{aligned} (c_\alpha, c_\beta)_r &= -\frac{2}{b_\lambda b_\lambda} M_{\alpha\beta}, \\ (c_\alpha, b_\beta)_r &= \delta_{\alpha\beta} + \frac{c_\alpha c_\beta}{c_\lambda c_\lambda} - 2 \frac{b_\alpha b_\beta}{b_\lambda b_\lambda}, \\ (b_\alpha, b_\beta)_r &= \frac{1}{c_\lambda c_\lambda} M_{\alpha\beta}. \end{aligned} \right\} \quad (3.60)$$

A hasonlóság (3.60) és (3.45) között szembeötlő. Értelmezhetjük két függvény, $F(a^\alpha)$ és $G(a^\alpha)$,

$$(F, G)_a^* = \lambda^{ab} \frac{\partial F}{\partial a^\alpha} \frac{\partial G}{\partial a^b} \quad (3.61)$$

zárójeles kifejezését, melynek felhasználásával (3.58) a

$$\frac{da^\alpha}{dt} = (a^\alpha, H)_a^* \quad (3.62)$$

alakban írható fel. Az a^α változók (1.46), (1.47) előállítását felhasználva kapjuk: $(F, G)_a^* = (F, G)_r$. A (3.61) kifejezést az

$$(F, G)_a = \varepsilon^{ab} \frac{\partial F}{\partial a^\alpha} \frac{\partial G}{\partial a^b} \quad (3.63)$$

Poisson-zárójeltől megkülönbözteti, hogy az a^a változókra érvényes mellékfeltételek jobb oldalán álló függvények vele szemben pusztá számokként viselkednek. Ennek megfelelően, míg az a^a változók (3.63) útján generált kanonikus transzformációi általában nem őrzik meg a mellékfeltételeket, a (3.61) útján generált transzformációk folyamán ezen feltételek alakja változatlan marad. Az utóbbi transzformációk az r^A változók (3.3) útján generált kanonikus transzformációinak csoportjával izomorf csoportot alkotnak. Megjegyzendő végül, hogy $(\cdot)_a^*$ is definiálható Dirac képletével.

A t időről a τ idő-paraméterre való áttérést a \mathbf{q} , \mathbf{p} , ill. \mathbf{x} , \mathbf{y} háromdimenziós változók használata mellett a (3.30), (3.31), (3.32), (3.33) kibővített kanonikus transzformáció segítségével írtuk le. A megfelelő négykomponensű változók: b_α és c_α , valamint π_α és q_α kapcsolatát (1.46) fejezi ki. A $\frac{p_0 \mathbf{p} \mathbf{q}}{mg}$ mennyiség (1.2), (1.34), (3.32) szerint $\pm \omega(\tau - t)$ -vel egyenlő. Az (1.36) mozgásegyenletek szerint q_α és π_α a τ paramétertől $E < 0$ esetén \sin és \cos , $E > 0$ mellett \sinh és \cosh függvényeken keresztül függ. Az (1.46) szolgáltatja c_α és b_α ugyanúgy függ t -től, összhangban az (1.48) alatt felírt mozgásegyenletekkel.

4. A teljes dinamikai szimmetriacsoport

Háromdimenziós terünkben valamely mozgásprobléma megoldásai: a mozgások, egyértelműen jellemezhetők pl. a \mathbf{q} Descartes-koordinátáknak és a konjugált $\mathbf{p} = m\dot{\mathbf{q}}$ impulzusoknak a $t=0$ időpontban felvett értékeivel.

Az $r^i \equiv q_i$, $r^{3+i} \equiv p_i$ hatkomponensű mennyiség értékeit a hatdimenziós fázistér segítségével szemléltethetjük. Az

$$\bar{r}^A = r^A + (r^A, \Phi)_r + \frac{1}{2} ((r^A, \Phi)_r, \Phi)_r + \frac{1}{3!} (((r^A, \Phi)_r, \Phi)_r, \Phi)_r + \dots \quad (4.1)$$

képlet, ahol $\Phi = \Phi(r^A)$ a fázistér pontjaiban értelmezett függvény, kanonikus transzformációt határoz meg. Az r^A változók valamely $\Psi(r^A)$ függvényére fennáll:

$$\Psi(\bar{r}^A) = \Psi(r^A) + (\Psi(r^A), \Phi(r^A))_r + \frac{1}{2} ((\Psi(r^A), \Phi(r^A))_r, \Phi(r^A))_r + \dots \quad (4.2)$$

Kanonikus transzformáció segítségével egy meghatározott mozgást jellemző, adott r^A mennyiségekből a probléma tetszőleges megoldását jellemző adott \bar{r}^A mennyiségek megkaphatók. Valóban, legyen

$$\Phi(r^A) = \varepsilon_{AB} r^A l^B \quad (4.3)$$

(ε_{AB} -t az $\varepsilon^{AS} \varepsilon_{SB} = \delta^A_B$ feltétel határozza meg; $l^B = \text{const.}$); ekkor (4.1) szerint

$$\bar{r}^A = r^A + l^A. \quad (4.4)$$

A (4.4) fázistérbeli eltolások csoportja igen fontos a kanonikus változók kvantummechanikai operátorainak definíciójával, a kvantummechanika ábrázoláselméleti megalapozásával kapcsolatban [64]. Mindamellett adott mozgásprobléma esetében a különböző mozgások között kapcsolatot létesítő ún. dinamikai szimmetriatranszformációk más, hasznosabb alakban is megfogalmazhatók.

A Newton-, ill. Coulomb-féle centrális potenciál hatása alatt végbemenő mozgás — a kezdeti időpontban felvett \mathbf{p}, \mathbf{q} értékek helyett — jellemezhető mindennek előtt az (1.3) impulzusmomentum-vektorral; megadhatjuk továbbá az (1.5) Runge—Lenz-vektort, mely (1.7) szerint \mathbf{L} -lel együtt meghatározza az $E \equiv H$ energiát. Tekintettel (1.6)-ra, az \mathbf{L}, \mathbf{K} mozgásállandók megadása öt adatot rögzít, melyek a pályát egyértelműen jellemzik. A mozgás egyértelmű jellemzéséhez szükséges egy hatodik adat: a mozgás fázisa. Ez pl. a (2.12), (2.13) és (2.31), (2.32) képletekben fellépő w paraméter $t=0$ -hoz tartozó értékének, vagy pl. a perihéliumon való áthaladás időpontjának megadásával rögzíthető.

Először vegyük szemügyre azokat a dinamikai szimmetria-transzformációkat, amelyek az adott mozgást az energia ugyanazon E értékéhez tartozó mozgásba transzformálják. Ezeknek (1.7) szerint változatlanul kell hagyniok az $\mathbf{L}^2 \pm \mathbf{K}^2$ kifejezést.

Képezzünk (4.1) szerint kanonikus transzformációt a $\Phi(r^4) = \mathbf{L}\lambda$ függvény segítségével ($\lambda = \text{const.}$); (4.2) segítségével az impulzusmomentum és a Runge—Lenz-vektor \mathbf{L}', \mathbf{K}' transzformáltjára kapjuk:

$$\mathbf{L}' = \mathbf{L} + \mathbf{I} \times \mathbf{L} \left(\lambda - \frac{\lambda^3}{3!} + \frac{\lambda^5}{5!} - \dots \right) + \mathbf{I} \times (\mathbf{I} \times \mathbf{L}) \left(\frac{\lambda^2}{2} - \frac{\lambda^4}{4!} + \frac{\lambda^6}{6!} - \dots \right), \quad (4.5)$$

$$\mathbf{K}' = \mathbf{K} + \mathbf{I} \times \mathbf{K} \left(\lambda - \frac{\lambda^3}{3!} + \frac{\lambda^5}{5!} - \dots \right) + \mathbf{I} \times (\mathbf{I} \times \mathbf{K}) \left(\frac{\lambda^2}{2} - \frac{\lambda^4}{4!} + \frac{\lambda^6}{6!} - \dots \right), \quad (4.6)$$

vagy

$$\mathbf{L}' = \mathbf{I}(\mathbf{I}\mathbf{L}) + [\mathbf{L} - \mathbf{I}(\mathbf{I}\mathbf{L})] \cos \lambda + \mathbf{I} \times \mathbf{L} \sin \lambda, \quad (4.7)$$

$$\mathbf{K}' = \mathbf{I}(\mathbf{I}\mathbf{K}) + [\mathbf{K} - \mathbf{I}(\mathbf{I}\mathbf{K})] \cos \lambda + \mathbf{I} \times \mathbf{K} \sin \lambda; \quad (4.8)$$

itt $\lambda = |\lambda|$, $\mathbf{I} = \lambda/\lambda$. Az \mathbf{L}', \mathbf{K}' vektorok az \mathbf{L}, \mathbf{K} vektorok λ forgásvektorú elforgatásával állnak elő.

Legyen most $\Phi(r^4) = \mathbf{K}\alpha$, ahol $\alpha = \text{const.}$ Az impulzusmomentum és a Runge—Lenz-vektor transzformáltjára $E < 0$ mellett hasonló módon kapjuk:

$$\mathbf{L}' = \mathbf{k}(\mathbf{k}\mathbf{L}) + [\mathbf{L} - \mathbf{k}(\mathbf{k}\mathbf{L})] \cos \alpha + \mathbf{k} \times \mathbf{L} \sin \alpha, \quad (4.9)$$

$$\mathbf{K}' = \mathbf{k}(\mathbf{k}\mathbf{K}) + [\mathbf{K} - \mathbf{k}(\mathbf{k}\mathbf{K})] \cos \alpha + \mathbf{k} \times \mathbf{L} \sin \alpha, \quad (4.10)$$

$E > 0$ esetén pedig

$$\mathbf{L}' = \mathbf{k}(\mathbf{k}\mathbf{L}) + [\mathbf{L} - \mathbf{k}(\mathbf{k}\mathbf{L})] \text{ch } \alpha + \mathbf{k} \times \mathbf{L} \text{sh } \alpha, \quad (4.11)$$

$$\mathbf{K}' = \mathbf{k}(\mathbf{k}\mathbf{K}) + [\mathbf{K} - \mathbf{k}(\mathbf{k}\mathbf{K})] \text{ch } \alpha + \mathbf{k} \times \mathbf{L} \text{sh } \alpha \quad (4.12)$$

($\alpha = |\alpha|$, $\mathbf{k} = \alpha/\alpha$).

Mindezek a transzformációk változatlanul hagyják az $\mathbf{L}^2 \pm \mathbf{K}^2$ kifejezést s így az (1.7) energiát. Belőlük az (1.8) másodrendű antiszimmetrikus tenzornak az azonos transzformációból kiindulva folytonosan nyerhető 4×4 -es valós ortogonális mátrixok ($E < 0$ mellett), ill. Lorentz-transzformációs mátrixok ($E > 0$ esetén) segítségével elvégzett bármely transzformációja felépíthető.

A (4.7), (4.8), (4.9), (4.10), (4.11), (4.12) transzformációs képletek levezetése fel kellett használnunk az (1.8) tenzor $M_{\alpha\beta}$ komponenseinek egymással képezett Poisson-féle zárójeles kifejezéseit. Az $M_{\alpha\beta}$ komponensek az

$$(M_{\alpha\beta}, M_{\gamma\delta})_r = \delta_{\alpha\gamma} M_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta} M_{\gamma\beta} + \delta_{\beta\gamma} M_{\delta\alpha} + \delta_{\beta\delta} M_{\alpha\gamma} \quad (4.13)$$

összefüggéseket teljesítik. Utalással az azonos transzformációból folytonosan nyerhető 4×4 -es valós ortogonális, ill. Lorentz-transzformációs mátrixok csoportjára, (4.13)-ra mint az $SO(4)$, ill. $SO(3,1)$ Poisson-féle zárójeles összefüggésekre hivatkozunk.

Természetesen ugyancsak (4.13) jobb oldalával egyenlő az $M_{\alpha\beta}$ tenzorkomponensek (3.61) szerint képezett $(M_{\alpha\beta}, M_{\gamma\delta})^*$ Dirac-féle zárójeles kifejezése. A (4.1), (4.2) transzformációs képletekben tetszés szerint használhatjuk a $(\cdot)_r$ vagy helyette a $(\cdot)_a^*$ zárójeles kifejezést; a (4.7), (4.8), (4.9), (4.10), (4.11), (4.12) eredmények mindkét választással megkaphatók.

Ami a primitív dinamikai változókat illeti, a $\Phi(r^A) = \mathbf{L}\lambda$ függvénnyel generált transzformáció a \mathbf{q}, \mathbf{p} Descartes-változók λ forgásvektorú elforgatását idézi elő. A $\Phi(r^A) = \mathbf{K}\mathbf{x}$ függvény segítségével képezett kanonikus transzformáció esetében azonban a transzformált \mathbf{q}', \mathbf{p}' változók számára nem adható meg zárt kifejezés [27]. Ha azonban az (1.46), (1.47) alatt bevezetett b_α, c_α négykomponensű mennyiségeket használjuk alapvető dinamikai változókként, ezekre egyszerű alakú transzformációs képleteket nyerünk. Fennállnak az

$$(M_{\alpha\beta}, b_\gamma)_a^* = \delta_{\alpha\gamma} b_\beta - \delta_{\beta\gamma} b_\alpha, \quad (4.14)$$

$$(M_{\alpha\beta}, c_\gamma)_a^* = \delta_{\alpha\gamma} c_\beta - \delta_{\beta\gamma} c_\alpha \quad (4.15)$$

zárójeles összefüggések; $(\cdot)_a^*$ helyett természetesen a $(\cdot)_r$ zárójeles kifejezés is ugyanúgy használható. A b_α, c_α mennyiségek $\mathbf{L}\lambda$ segítségével generált transzformációja:

$$\mathbf{b}' = \mathbf{I}(\mathbf{Ib}) + [\mathbf{b} - \mathbf{I}(\mathbf{Ib})] \cos \lambda + \mathbf{I} \times \mathbf{b} \sin \lambda, \quad b'_0 = b_0, \quad (4.16)$$

$$\mathbf{c}' = \mathbf{I}(\mathbf{Ic}) + [\mathbf{c} - \mathbf{I}(\mathbf{Ic})] \cos \lambda + \mathbf{I} \times \mathbf{c} \sin \lambda, \quad c'_0 = c_0, \quad (4.17)$$

ha pedig $\mathbf{K}\mathbf{x}$ -t választjuk generátorfüggvénynek, a transzformációs képletek $E < 0$ mellett:

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{b}' &= \mathbf{b} - \mathbf{k}(\mathbf{kb}) + \mathbf{k}(\mathbf{kb}) \cos \kappa - \mathbf{k}b_0 \sin \kappa, \\ b'_0 &= b_0 \cos \kappa + \mathbf{k}\mathbf{b} \sin \kappa, \end{aligned} \right\} \quad (4.18)$$

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{c}' &= \mathbf{c} - \mathbf{k}(\mathbf{kc}) + \mathbf{k}(\mathbf{kc}) \cos \kappa - \mathbf{k}c_0 \sin \kappa, \\ c'_0 &= c_0 \cos \kappa + \mathbf{k}\mathbf{c} \sin \kappa, \end{aligned} \right\} \quad (4.19)$$

$E > 0$ esetén pedig

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{b}' &= \mathbf{b} - \mathbf{k}(\mathbf{kb}) + \mathbf{k}(\mathbf{kb}) \operatorname{ch} \kappa - \mathbf{k}b_0 \operatorname{sh} \kappa, \\ b'_0 &= b_0 \operatorname{ch} \kappa - \mathbf{k}\mathbf{b} \operatorname{sh} \kappa, \end{aligned} \right\} \quad (4.20)$$

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{c}' &= \mathbf{c} - \mathbf{k}(\mathbf{kc}) + \mathbf{k}(\mathbf{kc}) \operatorname{ch} \kappa - \mathbf{k}c_0 \operatorname{sh} \kappa, \\ c'_0 &= c_0 \operatorname{ch} \kappa - \mathbf{k}\mathbf{c} \operatorname{sh} \kappa; \end{aligned} \right\} \quad (4.21)$$

itt a $b_0 = (\pm)^{\frac{1}{2}} b_4$, $c_0 = (\pm)^{\frac{1}{2}} c_4$ jelölést alkalmaztuk. A b_α, c_α négykomponensű mennyiségek eszerint az $SO(4)$, ill. $SO(3,1)$ transzformációkkor mint négyesvektorok transzformálódnak.

Generáljunk kanonikus transzformációt a $\Phi(r^A) = Nv$ függvény segítségével. Az (1.9), (1.44) és (1.45) képletek szerint N a $\pm \left(\pm \frac{1}{2} M_{\alpha\lambda} M_{\alpha\lambda} \right)^{\frac{1}{2}}$ alakban fejezhető ki az $M_{\alpha\beta}$ tenzorral. A (4.13) zárójeles összefüggés felhasználásával kapjuk:

$$(M_{\alpha\beta}, N)_r = 0. \quad (4.22)$$

A szóban forgó transzformációk az $M_{\alpha\beta}$ tenzort, és így az (1.9) energiát is, változatlanul hagyják. Most is a Hamilton-függvény invariancia-transzformációival állunk szemben. A b_α, c_α dinamikai változók transzformációs képleteinek leszarmaztatásához célszerű, ha N -et ezekkel a változókkal fejezzük ki:

$$N = \pm (\pm b_\alpha b_\alpha)^{\frac{1}{2}} (c_\alpha c_\alpha)^{\frac{1}{2}}, \quad (4.23)$$

és a transzformációt a $(\cdot)_a^*$ zárójeles kifejezés segítségével generáljuk. Fennáll:

$$(b_\alpha, N)_a^* = \mp m\omega c_\alpha, \quad (4.24)$$

$$(c_\alpha, N)_a^* = (m\omega)^{-1} b_\alpha. \quad (4.25)$$

Ezt felhasználva b_α és c_α transzformáltjára $E < 0$ mellett a

$$\left. \begin{aligned} b'_\alpha &= b_\alpha \cos v - m\omega c_\alpha \sin v, \\ c'_\alpha &= c_\alpha \cos v + (m\omega)^{-1} b_\alpha \sin v, \end{aligned} \right\} \quad (4.26)$$

$E > 0$ esetén pedig a

$$\left. \begin{aligned} b'_\alpha &= b_\alpha \operatorname{ch} v + m\omega c_\alpha \operatorname{sh} v, \\ c'_\alpha &= c_\alpha \operatorname{ch} v + (m\omega)^{-1} b_\alpha \operatorname{sh} v \end{aligned} \right\} \quad (4.27)$$

kifejezést kapjuk. Tekintettel a pályát meghatározó \mathbf{L}, \mathbf{K} mozgásállandók invarianciájára, ezek a transzformációk az ugyanazon a pályán végbemenő, különböző fázisú mozgások között létesítenek kapcsolatot. Megjegyzendő, hogy a (4.26), (4.27) kifejezések, ha bennük v -t ωt -vel helyettesítjük, az (1.48) mozgásegyenletek megoldásait szolgáltatják.

Az $M_{\alpha\beta}, N$ mozgásállandókkal generált kanonikus transzformációk alkotta dinamikai szimmetriacsoport a Hamilton-függvénynek invariancia-csoportja. Az energia értékét megváltoztató, ún. nem-invariancia transzformációkat oly módon kaphatunk, ha a választott generátor-függvénynek a Hamilton-függvénnyel képezett $(\cdot)_r$ Poisson- vagy $(\cdot)_a^*$ Dirac-féle zárójeles kifejezése zérustól különböző.

Ilyen nem-invariancia generátorként célszerű bevezetni a b_α, c_α változók

$$B_\alpha = \pm (c_\alpha c_\alpha)^{\frac{1}{2}} b_\alpha, \quad C_\alpha = (\pm b_\alpha b_\alpha)^{\frac{1}{2}} c_\alpha \quad (4.28)$$

kifejezéseit. Rendezzük el a $B_\alpha, C_\alpha, M_{\alpha\beta}, N$ mennyiségeket a következő 6×6 -os antiszimmetrikus szkémába:

$$(G_{IJ}) = \begin{pmatrix} M_{\alpha\beta} & -iB_\alpha & (\mp)^{-\frac{1}{2}} C_\alpha \\ iB_\alpha & 0 & (\pm)^{\frac{1}{2}} N \\ -(\mp)^{-\frac{1}{2}} C_\alpha & -(\pm)^{\frac{1}{2}} N & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.29)$$

A G_{IJ} komponensek között fennálló valamennyi zárójeles összefüggést egyetlen képletbe sűrítethetjük:

$$(G_{IJ}, G_{KL})_r = \delta_{IK} G_{JL} + \delta_{IL} G_{KJ} + \delta_{JK} G_{LI} + \delta_{JL} G_{IK}; \quad (4.30)$$

$(\cdot)_r$ helyett természetesen itt is használhatjuk a $(\cdot)_a^*$ Dirac-féle zárójeles kifejezést. A B_α, C_α mennyiségek segítségével generált kanonikus transzformációk analitikus kifejezése ennek alapján meghatározható [53]. A kötött állapotok és

a pozitív energiák esetére egyaránt az $SO(4,2)$ csoportot kapjuk. Lehetővé teszi továbbá a (4.29) jelölés a B_α , C_α , $M_{\alpha\beta}$, N mennyiségeket összekapcsoló kinematikai azonosságok tömör felírását is. Fennáll:

$$G_{IS}G_{SJ}=0, \quad (4.31)$$

$$\varepsilon_{IJPQRS}G_{PQ}G_{RS}=0; \quad (4.32)$$

(4.31) és (4.32) az (1.27), (1.29), (1.30), (4.23), (4.28), valamint az (1.10), (1.24), (1.25), (1.28) képletek segítségével verifikálható s velük azonos tartalmú.

A fent talált $SO(4,2)$ dinamikai szimmetriacsoport segítségével adott kötött mozgásból kiindulva tetszőleges kötött mozgásállapot megkapható; hasonló kapcsolatot állapít meg az $SO(4,2)$ csoport a pozitív energiájú mozgások között. Azonkívül a G_{IJ} generátorok segítségével bármely dinamikai mennyiség kifejezhető; így pl.

$$b_\alpha = \pm mg N^{-2} B_\alpha, \quad c_\alpha = \pm (mg)^{-1} N C_\alpha. \quad (4.33)$$

Az $SO(4,2)$ csoportot ezért teljes dinamikai csoportnak nevezzük.

A Hamilton-függvény invariancia-csoportját magában foglaló csoport generátorait első ízben Bacry határozta meg a klasszikus mechanikában [32], ki a kötött állapotok esetében az L és K generálta $SO(4)$ csoportot $SO(4,1)$ csoporttá bővítette ki.

Megemlíthető, hogy a teljes dinamikai csoportot a τ idő-paraméter alapulvétele mellett is megszerkeszthetjük. Ez azonnal nyilvánvaló, ha pl. az (1.36), (1.48) mozgásegyenletekre tekintünk; ezek egymásból Q_α és c_α , π_α és b_α , τ és t felcserélésével nyerhetők.

Legyen

$$P_\alpha = \pm (Q_\alpha Q_\alpha)^{\frac{1}{2}} \pi_\alpha, \quad R_\alpha = (\pm \pi_\alpha \pi_\alpha)^{\frac{1}{2}} Q_\alpha, \quad (4.34)$$

azonkívül (4.23) helyett írható:

$$N = \pm (\pm \pi_\alpha \pi_\alpha)^{\frac{1}{2}} (Q_\alpha Q_\alpha)^{\frac{1}{2}}. \quad (4.35)$$

Rendezzük el ezeket az (1.28) alatt megadott $M_{\alpha\beta}$ -val együtt a következő 6×6 -os antiszimmetrikus skémába:

$$(\Gamma_{IJ}) = \begin{pmatrix} M_{\alpha\beta} & -iP_\alpha & (\mp)^{-\frac{1}{2}} R_\alpha \\ iP_\alpha & 0 & (\pm)^{\frac{1}{2}} N \\ -(\pm)^{-\frac{1}{2}} R_\alpha & -(\pm)^{\frac{1}{2}} N & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.36)$$

Fennál

$$(\Gamma_{IJ}, \Gamma_{KL})_\sigma^* = \delta_{IK} \Gamma_{JL} + \delta_{IL} \Gamma_{KJ} + \delta_{JK} \Gamma_{LI} + \delta_{JL} \Gamma_{IK}, \quad (4.37)$$

valamint

$$\Gamma_{IS} \Gamma_{SJ} = 0, \quad (4.38)$$

$$\varepsilon_{IJPQRS} \Gamma_{PQ} \Gamma_{RS} = 0. \quad (4.39)$$

A (4.37) képletben természetesen $(\cdot)_\sigma^*$ helyett használhatjuk a $(\cdot)_z$ Poisson-féle zárójeles kifejezést. Az $M_{\alpha\beta}$, N mozgásállandók x -szel és y -nal kifejezett alakja (1.42), (1.43), (1.45) alatt látható; a P_α , R_α nem-invariancia generátorokra (1.1), (1.2), (1.16), (1.18), (1.19), (1.20), (1.21), (1.22), (1.40), (1.41), (1.43) felhasználásával

kapjuk:

$$\mathbf{P} = \mathbf{x}\mathbf{y}, \quad P_4 = (\pm)^{-\frac{1}{2}} x(1 \mp y^2), \quad (4.40)$$

$$\mathbf{R} = \frac{1}{2} (1 \pm y^2) \mathbf{x} \mp (\mathbf{x}\mathbf{y})\mathbf{y}, \quad R_4 = -(\pm)^{\frac{1}{2}} \mathbf{x}\mathbf{y}. \quad (4.41)$$

A (4.29) és (4.36) szkémákban az $I, J=1, 2, 3, 4$ és $I, J=5, 6$ helyeken ugyanazon $M_{\alpha\beta}$, ill. N mozgásállandók állnak. A B_α, C_α és P_α, R_α nem-invariancia generátorok kapcsolata kifejezhető a következő alakban. Legyen

$$A_\alpha = C_\alpha + (\mp)^{\frac{1}{2}} B_\alpha, \quad \tilde{A}_\alpha = C_\alpha - (\mp)^{\frac{1}{2}} B_\alpha, \quad (4.42)$$

$$Q_\alpha = R_\alpha + (\mp)^{\frac{1}{2}} P_\alpha, \quad \tilde{Q}_\alpha = R_\alpha - (\mp)^{\frac{1}{2}} P_\alpha; \quad (4.43)$$

fennáll:

$$A_\alpha = \exp [-(\mp)^{\frac{1}{2}} \omega(t-\tau)] Q_\alpha, \quad \tilde{A}_\alpha = \exp [(\mp)^{\frac{1}{2}} \omega(t-\tau)] \tilde{Q}_\alpha, \quad (4.44)$$

vagy másként

$$A_\alpha = \exp \left[(\mp)^{\frac{1}{2}} \frac{\mathbf{p}\mathbf{q}}{N} \right] Q_\alpha, \quad \tilde{A}_\alpha = \exp \left[-(\mp)^{\frac{1}{2}} \frac{\mathbf{p}\mathbf{q}}{N} \right] \tilde{Q}_\alpha. \quad (4.45)$$

A Newton-, ill. Coulomb-potenciál hatása alatt végbemenő klasszikus mozgás dinamikai szimmetriáinak megismerését, tisztázását nagymértékben elősegítette a τ idő-paraméter segítségével megadott tárgyalás. A kvantummechanikában ugyan csak hasznát látjuk majd e tárgyalásmódnak s az \mathbf{x}, \mathbf{y} kanonikus változóknak.

5. A dinamikai szimmetriák a kvantummechanikában

A kvantummechanikában a dinamikai szimmetria-transzformációknak a kvantummechanikai állapotra ható operátorok felelnek meg; az állapotvektorok terének ezen transzformációi a dinamikai szimmetriacsoportok ábrázolásait létesítik. A dinamikai szimmetria-transzformációk kvantummechanikai megfogalmazása történhet pl. a fellépő dinamikai csoportok ábrázolásainak matematikai irodalmában megtalálható eredmények felhasználásával. Célszerűbb azonban, ha az adott fizikai probléma esetében rövid úton eredményre vezető speciális módszer használatához folyamodunk.

A dinamikai szimmetriacsoportok ábrázolásainak generátorait gyakran szerkesztik meg a kanonikus felcserélési összefüggéseket teljesítő operátorok felhasználásával. (Jó azonban, ha emlékeztünkben tartjuk, hogy vannak esetek, amikor kanonikus cserelációkat teljesítő operátorok nem definiálhatók [64]. Ilyenkor a kvantummechanikai megfogalmazás közvetlenül a dinamikai szimmetriacsoport és annak ábrázoláselmélete segítségével adható meg.)

Ha a (4.29) klasszikus $SO(4,2)$ generátorok kvantummechanikai operátorait \mathbf{q} és \mathbf{p} operátoraiból kívánnánk megszerkeszteni, az utóbbiak bonyolult, négyzetgyököket és trigonometrikus, ill. hiperbolikus függvényeket tartalmazó kifejezései- nek kvantummechanikai operátorait kellene megkeresnünk. Nem világos, hogy ez a közvetlen szerkesztés miképpen végezhető el egyértelműen. Gondolhatnánk arra, hogy a (4.29), ill. (4.36) klasszikus generátorok kvantummechanikai operátorait

a c_x, b_x , ill. q_x, π_x változókhoz rendelt operátorokból szeresszük meg. Ehhez a (3.45), ill. (3.60) csererelációkat teljesítő operátorokra lenne szükség. Mindezeknél egyszerűbbnek látszik az (1.42), (1.43), (1.45), (4.40), (4.41) klasszikus mennyiségek kvantummechanikai operátorait — vagyis a (4.36)-nak megfelelő kvantum-generátorokat — az \mathbf{x}, \mathbf{y} kanonikus változók operátoraiból kiindulva megszerkeszteni.

Valamely AB szorzat hermitikus operátorának megszerkesztéséhez gyakran használt $\frac{1}{2}(AB+BA)$ szimmetrizálási szabály nem vezet el a kívánt helyes eredményhez [50]. Ezért más úton indulunk el: az energia Schrödinger-féle sajátérték-egyenletét hívjuk segítségül, pl. a konfigurációs térben. Bevezetve a

$$\left[-\frac{1}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial q_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial q_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial q_3^2} \right) - \frac{g}{q} \right] \psi(\mathbf{q}) = E\psi(\mathbf{q}) \quad (5.1)$$

differenciál-egyenletbe az $\mathbf{x} = p_0 \mathbf{q}$ változót [vö. (1.41)], ahol $p_0 = \sqrt{\mp 2mE}$, kapjuk:

$$\frac{1}{2} x^\pm \left[1 \mp \left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_3^2} \right) \right] x^\pm \varphi(\mathbf{x}) = \pm \frac{mg}{p_0} \varphi(\mathbf{x}); \quad (5.2)$$

itt a $\varphi(\mathbf{x}) = \alpha x^{-\frac{1}{2}} \psi\left(\frac{\mathbf{x}}{p_0}\right)$ jelölést alkalmaztuk ($\alpha = \text{const.}$). Itt a bal oldalon hermitikus operátor áll $\varphi(\mathbf{x})$ előtt; ezt tekintjük az (1.45) klasszikus mennyiség kvantummechanikai reprezentációjának (\mathbf{x} -reprezentációban). Az E energia-sajátérték, valamint az (5.2) egyenlet jobb oldalán álló $n = \pm mg/p_0$ sajátérték kapcsolata

$$E = \mp \frac{mg^2}{2n^2}, \quad (5.3)$$

ami pontosan olyan alakú, mint a klasszikus Hamilton-függvényt N kifejezéseként előállító (1.44) összefüggés.

Legyenek tehát \mathbf{x} és \mathbf{y} kanonikus felcserélési összefüggéseket teljesítő operátorok:

$$[x_j, x_k] = 0, \quad [x_j, y_k] = i\delta_{jk}, \quad [y_j, y_k] = 0; \quad (5.4)$$

az (1.45) klasszikus mennyiséget reprezentálja az

$$N = \frac{1}{2} x^\pm (1 \pm y^2) x^\pm \quad (5.5)$$

operátor. Vezessük be az $U = (\pm)^{\frac{1}{2}} P_4$, $V = (\pm)^{\frac{1}{2}} R_4$ jelöléseket. Ezeknek a mennyiségeknek az

$$U = \frac{1}{2} x^\pm (1 \mp y^2) x^\pm, \quad V = \mp \frac{1}{2} x^\pm \left(\mathbf{y} \frac{\mathbf{x}}{x} + \frac{\mathbf{x}}{x} \mathbf{y} \right) x^\pm \quad (5.6)$$

operátorokat feleltetjük meg. Fennáll:

$$[N, U] = iV, \quad [V, N] = \pm iU, \quad [U, V] = \mp iN, \quad (5.7)$$

valamint

$$\pm U^2 + V^2 \mp N^2 + \mathbf{L}^2 = 0, \quad (5.8)$$

ahol az \mathbf{L} operátort az (1.42) klasszikus kifejezéssel azonos alakú

$$\mathbf{L} = \mathbf{x} \times \mathbf{y} \quad (5.9)$$

képlet definiálja.

Mindezek alapján máris meghatározhatjuk tisztán algebrai úton a H atom kötött állapotainak diszkrét spektrumát.

A kötött állapotokra szorítkozva vezessük be a $W_{\pm} = V \mp iU$ operátorokat. Az (5.7), (5.8) képletek alapján írható:

$$[N, W_{\pm}] = \pm W_{\pm}, \quad [W_+, W_-] = -2N; \quad (5.10)$$

$$W_{\mp} W_{\pm} = N(N \pm 1) - \mathbf{L}^2. \quad (5.11)$$

Tartozzék az absztrakt állapotér $|nl\rangle$ vektora az N és \mathbf{L}^2 operátorok n , ill. $l(l+1)$ sajátértékéhez. Ezt megkövetelhetjük, mivel

$$[\mathbf{L}, N] = 0. \quad (5.12)$$

Hasonlóképpen fennáll:

$$[\mathbf{L}, W_{\pm}] = 0. \quad (5.13)$$

A W_{\pm} operátor az $|nl\rangle$ állapotvektor l kvantumszámát változtatlanul hagyja, ugyanakkor (5.10) értelmében n -et $n \pm 1$ -re változtatja:

$$W_{\pm} |nl\rangle = \alpha_{\pm}(nl) |n \pm 1, l\rangle. \quad (5.14)$$

Ha megköveteljük az $|nl\rangle$, $|n \pm 1, l\rangle$ állapotvektorok normáltságát, tekintettel (5.11)-re $\alpha_{\pm}(nl)$ így választható:

$$\alpha_{\pm}(nl) = \sqrt{n(n \pm 1) - l(l+1)}. \quad (5.15)$$

Itt a négyzetgyök alatt szükségképpen nemnegatív kifejezés áll. Mivel n a kötött állapotokra nem lehet negatív, $n \geq l+1$; adott l mellett N spektruma: $n = l+1, l+2, \dots$

Ugyancsak meghatározhatók tisztán algebrai úton a Schrödinger-féle energia-sajátfüggvények. Az (5.5), (5.6) képletek alapján írható:

$$x = N + U. \quad (5.16)$$

Az x operátor ξ sajátértékhez tartozó $|\xi\rangle$ sajátvektorát fejtsük ki a kötött állapotok N operátorának sajátvektorai szerint. Ez utóbbiakat válasszuk oly módon, hogy N mellett — mint fent is — az \mathbf{L}^2 operátornak, valamint L_3 -nak is sajátvektorai legyenek. Ezt (5.12) lehetővé teszi, (5.13) pedig mutatja, hogy az L_3 operátor sajátértékét, az m kvantumszámot a W_{\pm} operátorok nem változtatják meg. Írjuk tehát:

$$|\xi\rangle = \sum_{nlm} |nlm\rangle \langle nlm | \xi \rangle. \quad (5.17)$$

Az x operátornak (5.17) sajátvektora a ξ sajátérték mellett; másrésről x hatásának megállapítására felhasználhatjuk (5.16)-ot, valamint az N és $U = \frac{i}{2} (W_+ - W_-)$

operátorok hatását meghatározó képleteket [vö. (5.14), (5.15)]. Ily módon kapjuk:

$$\begin{aligned} \sum_{nlm} \xi |nlm\rangle \langle nlm|\xi\rangle &= \\ &= \sum_{nlm} \left[n |nlm\rangle + \frac{i}{2} (\sqrt{n(n+1)-l(l+1)} |n+1, lm\rangle - \sqrt{n(n-1)-l(l+1)} |n-1, lm\rangle) \right] \cdot \\ &\quad \cdot \langle nlm|\xi\rangle \end{aligned} \quad (5.18)$$

vagy a független $|nlm\rangle$ állapotvektorok együtthatóit mindkét oldalon egymással egyenlővé téve:

$$\begin{aligned} \xi \langle nlm|\xi\rangle &= n \langle nlm|\xi\rangle + \\ &+ \frac{i}{2} (\sqrt{n(n-1)-l(l+1)} \langle n-1, lm|\xi\rangle - \sqrt{n(n+1)-l(l+1)} \langle n+1, lm|\xi\rangle). \end{aligned} \quad (5.19)$$

A kötött állapotok $\langle nlm|\xi\rangle$ valószínűségi amplitúdóira, azaz a Schrödinger-féle energia-sajátfüggvényekre érvényes rekurziós összefüggéseket kaptuk.

A pozitív energiájú Schrödinger-féle sajátfüggvények tisztán algebrai meghatározásához abból az észrevételből indulhatunk ki, hogy az U operátor kötött állapotokra ugyanolyan alakú, mint az N operátor pozitív energia mellett (és megfordítva). Keressük meg a kötött állapotokhoz tartozó U operátor $|vlm\rangle$ sajátvektorait:

$$U|vlm\rangle = v|vlm\rangle. \quad (5.20)$$

A $|vlm\rangle$ sajátvektorok

$$|vlm\rangle = \sum_n |nlm\rangle \langle nlm|vlm\rangle \quad (5.21)$$

kifejtésére az $U = \frac{i}{2}(W_+ - W_-)$ operátort (5.14), (5.15) tekintetbe vételével alkalmazva kapjuk:

$$\begin{aligned} U|vlm\rangle &= \sum_n \frac{i}{2} (\sqrt{n(n+1)-l(l+1)} |n+1, lm\rangle - \sqrt{n(n-1)-l(l+1)} |n-1, lm\rangle) \cdot \\ &\quad \cdot \langle nlm|vlm\rangle. \end{aligned} \quad (5.22)$$

Innen leolvashatjuk az $\langle nlm|vlm\rangle$ transzformációs mátrixelemekre vonatkozó rekurziós összefüggést:

$$\begin{aligned} v \langle nlm|vlm\rangle &= \\ &= \frac{i}{2} (\sqrt{n(n-1)-l(l+1)} \langle n-1, lm|vlm\rangle - \sqrt{n(n+1)-l(l+1)} \langle n+1, lm|vlm\rangle). \end{aligned} \quad (5.23)$$

Az $\langle nlm|vlm\rangle$ mátrixelemek explicit kifejezését elsőként Barut és Phillips adta meg [65]; lásd ezenkívül [66, 67, 68].

Az utóbbiak ismeretében (5.21) megadja a $\langle \xi|vlm\rangle$ pozitív energiájú Schrödinger-féle sajátfüggvényeket a diszkrét spektrum $\langle \xi|nlm\rangle$ Schrödinger-sajátfüggvényeivel kifejezve.

Mindez mutatja, miképpen nyerhetők az (5.7) csererelációkat teljesítő kvantummechanikai generátorok segítségével fizikai információk.

A fent bevezetett N , $U = (\pm)^{\frac{1}{2}} P_4$, $V = (\pm)^{\frac{1}{2}} R_4$ és L operátorok rendszerét további kilenc operátor bevezetésével kiegészítve megalkothatjuk a teljes (4.36)

szkéma kvantummechanikai megfelelőjét [52]; a Γ_{IJ} operátorok a

$$[\Gamma_{IJ}, \Gamma_{KL}] = i(\delta_{IK}\Gamma_{JL} + \delta_{IL}\Gamma_{KJ} + \delta_{JK}\Gamma_{LI} + \delta_{JL}\Gamma_{IK}) \quad (5.24)$$

felcserélési összefüggéseket, valamint a

$$\Gamma_{IS}\Gamma_{SJ} + \Gamma_{JS}\Gamma_{SI} = 2\delta_{IJ}, \quad (5.25)$$

$$\varepsilon_{IJPQRS}\Gamma_{PQ}\Gamma_{RS} = 0 \quad (5.26)$$

azonosságokat teljesítik. A $P_j = i\Gamma_{j5}$ operátorokat a

$$\mathbf{P} = x^{\frac{1}{2}} \mathbf{y} x^{\frac{1}{2}} \quad (5.27)$$

alakúnak választva, és (5.24) felhasználásával leszámítatva az

$$\mathbf{R} = \frac{1}{4} x^{\frac{1}{2}} \left[(1 \pm y^2) \frac{\mathbf{x}}{x} + \frac{\mathbf{x}}{x} (1 \pm y^2) \pm \left(\frac{\mathbf{x}}{x} \mathbf{y} + \mathbf{y} \frac{\mathbf{x}}{x} \right) \mathbf{y} \pm \mathbf{y} \left(\frac{\mathbf{x}}{x} \mathbf{y} + \mathbf{y} \frac{\mathbf{x}}{x} \right) \right] x^{\frac{1}{2}}, \quad (5.28)$$

és

$$\mathbf{K} = \frac{1}{4} x^{\frac{1}{2}} \left[(1 \mp y^2) \frac{\mathbf{x}}{x} + \frac{\mathbf{x}}{x} (1 \mp y^2) \mp \left(\frac{\mathbf{x}}{x} \mathbf{y} + \mathbf{y} \frac{\mathbf{x}}{x} \right) \mathbf{y} \mp \mathbf{y} \left(\frac{\mathbf{x}}{x} \mathbf{y} + \mathbf{y} \frac{\mathbf{x}}{x} \right) \right] x^{\frac{1}{2}} \quad (5.29)$$

kifejezéseket, a kívánt kvantummechanikai generátorokat kapjuk. Megfordítva, az \mathbf{x}, \mathbf{y} kanonikus operátorok a Γ_{IJ} generátorok segítségével az

$$\mathbf{x} = \mathbf{R} + \mathbf{K}, \quad \mathbf{y} = (N + U)^{-\frac{1}{2}} \mathbf{P} (N + U)^{-\frac{1}{2}} \quad (5.30)$$

alakban fejezhetők ki. Ily módon bármely, \mathbf{x} és \mathbf{y} kifejezésekként felírható operátor mátrixelemei kifejezhetők a Γ_{IJ} kvantummechanikai $\text{SO}(4,2)$ generátorok mátrix-elemeivel.

Az \mathbf{x}, \mathbf{y} kanonikus operátorok segítségével megadott leírás, valamint a probléma \mathbf{p} és \mathbf{q} használatán alapuló, megszokott megfogalmazása között a kapcsolatot a következőképpen állapíthatjuk meg. Az (5.1), (5.2) egyenletekhez kapcsolódva azt találtuk, hogy az \mathbf{x} -reprezentációban felírt N operátor (és így a $H = \mp \frac{mg^2}{2} N^{-2}$ Hamilton-operátor) $\varphi(\mathbf{x})$ sajátfüggvényei a \mathbf{q} -reprezentációban felírt Schrödinger-egyenlet $\psi(\mathbf{q})$ megoldásaival a

$$\varphi(\mathbf{q}) = \alpha q^{-\frac{1}{2}} \psi \left(\frac{\mathbf{q}}{p_0} \right) \quad (5.31)$$

kapcsolatban állnak; itt α a φ , ill. ψ állapottól függ és úgy választható, hogy normált ψ mellett φ is normált legyen, p_0 pedig az N operátor n sajátértékével a $p_0 = \pm \frac{mg}{n}$ kapcsolatban áll.

Az (5.31) kifejezésben az energiafüggő skálatranszformáció leírható az $f(a\mathbf{x}) = a^{x^\nabla} f(\mathbf{x})$ által értelmezett „dilatációs operátor” segítségével [39, 40, 43]:

$$\varphi(\mathbf{q}) = \alpha q^{-\frac{1}{2}} \left(\pm \frac{\vec{\mathcal{N}}}{mg} \right)^{i_{\text{qp}}} \psi(\mathbf{q}); \quad (5.32)$$

itt a \rightarrow jel azt jelenti, hogy a $\pm (mg)^{-1} \vec{\mathcal{N}}$ operátor az exponenciális kifejtésekor

minden mástól jobbra írandó, az \mathcal{N} operátort pedig a ψ energia-sajátfüggvényekre gyakorolt

$$\mathcal{N}\psi(\mathbf{q}) = m\psi(\mathbf{q}) \quad (5.33)$$

hatásán keresztül definiáljuk. Az operátort, mely a $\psi(\mathbf{q})$ sajátfüggvényeket a megfelelő $\varphi(\mathbf{q})$ sajátfüggvényekbe viszi át, jelöljük röviden O -val:

$$\varphi(\mathbf{q}) = O\psi(\mathbf{q}). \quad (5.34)$$

A $\varphi(\mathbf{q})$ állapotokra ható Γ'_{IJ} kvantummechanikai $SO(4,2)$ generátorok alakját fent megismertük; azokból a $\psi(\mathbf{q})$ állapotokra ható G_{IJ} generátorok a

$$G_{IJ} = O^{-1}\Gamma'_{IJ}O \quad (5.35)$$

képlet szerint adódnak. (A Γ'_{IJ} -vel jelölt generátor Γ_{IJ} -ből az $\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{q}$, $\mathbf{y} \rightarrow \mathbf{p}$ helyettesítéssel áll elő).

A kötött állapotokra $\alpha = (mg)^{-3/2}n^2$; ezt felhasználva megállapítható, hogy az (5.35) alatt nyert kvantummechanikai $SO(4,2)$ generátorok magukban foglalják a Musto [40], valamint Pratt és Jordan [39] által kapott $SO(4,1)$ generátorokat, amelyeket ők a H atom gömbi, ill. parabolikus koordinátákban felírt Schrödinger-féle sajátfüggvényeinek felhasználásával határoztak meg.

Az (5.35) generátorok teljesítik az (5.24), (5.25), (5.26) egyenletekkel analóg felcserélési összefüggéseket és azonosságokat. Meghatározásukkal az $SO(4,2)$ dinamikai szimmetria, mely magában foglal minden fizikai információt, maradéktalan megfogalmazást nyert a kvantummechanikában.

Zárószó

A jelen értekezésben összefoglalt munkák célja a távolsággal fordítottan arányos vonzó (Newton- vagy Coulomb-) potenciál dinamikai szimmetriáinak tanulmányozása volt.

Kiindulópontként szolgált az az észrevétel, hogy Pauli alapvető dolgozatában [7] csak a mozgásállandók transzformációs tulajdonságaival foglalkozik, a primitív dinamikai változók transzformációs tulajdonságaival azonban nem, továbbá az a kérdés, hogy miként lehet *Fock* elméletét [10] a megszokott kvantálási módszer alapját képező kanonikus formalizmus keretei közé beilleszteni. Feltétlenül meg kell említeni a munkánk számára nyújtott ösztönzést, a kérdésfeltevéseket, melyekkel főként *Bacry*, *Barut*, *Fronsdal* [32, 33, 42, 43, 44, 45] dolgozatai szolgáltak.

Az értekezés jelentős mértékben a szerző [14, 51, 52, 53, 54, 55] közleményein alapszik, de több ponton túl megy azokon. A tárgy koránt sincs kimerítve. Úgy tetszik, elérkezett egy összefoglaló, monografikus cikk megírásának az ideje, mely a H atom dinamikájának maradéktalan kifejtését (minden, a kísérlet számára hozzáférhető mennyiség leszámaztatását) adja az $SO(4,2)$ teljes dinamikai csoport alapján. Figyelmet érdemelnek továbbá a relativisztikus problémák; így *P. Budini* javasolta* az 1—2. fejezetekben bemutatott geometriai megközelítés alkalmazását a klasszikus-relativisztikus Kepler-mozgásra.

* Személyes közlés.

A relativisztikus problémák területére esik több közlemény [69, 70, 71, 72, 73, 74], mely munkánkhoz kapcsolódik; ugyancsak jelentősége lehet a geometriai megközelítésnek az ún. korrespondencia-azonosságokkal kapcsolatban [75, 76].

A dinamikai problémák csoportelméleti megközelítésének módszeréről kimerítő értékelést kevés szóval aligha lehet adni.

Egyrésről utalunk a tárgy iránt megnyilvánuló érdeklődésre, részletesebb diszkusszióval szolgáló összefoglaló cikkekre, monográfiákra [77, 78, 79, 80, 81].

Másrésről legyen szabad néhány általános megjegyzést tenni. A fizika valamely ágának a matematikai leírasmódok szerves részét képezik. Aligha tagadhatná valaki, hogy a newtoni mechanika Lagrange- vagy Hamilton-féle újrafogalmazása mérhetetlenül gazdagította fizikai ismereteinket. Szintén nevezetes megismerés, hogy a csoportelmélet absztrakciói par excellence alkalmasak bizonyos dinamikai problémák megragadására. A részecskefizika területén a Lie-csoportok formalizmusa rendkívül gyümölcsözőnek bizonyult olyan esetekben, amelyekben a térelméleti Lagrange- vagy Hamilton-formalizmus láthatóan nem vezet célhoz. A dinamikai problémák csoportelméleti nézőpontú tanulmányozása, a dinamikai szimmetriacsoportok megismerése nézetünk szerint a klasszikus és a kvantummechanikában is izgalmas és szép, elsőrangú tudományos érdekességű feladat, mely megéri a további erőfeszítéseket.

IRODALOM

1. *J. Kepleri*, *Astronomi Opera Omnia*. Ed. Ch. Frisch. Frankofurti a. M. et Erlangae, 1868—1871.
2. *Oeuvres de Laplace*, Tome I., Imprimerie Royale, Paris, 1843, 187. old.
3. *C. G. J. Jacobi*, *Crelle's Journ. Math.* **24**, 5, 1842.
4. *W. R. Hamilton*, *Proceedings of the Royal Irish Academy* **3**, Appendix XXXVI, 110, 1847.
5. *C. Runge*, *Vektoranalysis*, Band I., Hirzel, Leipzig, 1919, 68. old.
6. *W. Lenz*, *Z. Physik* **24**, 197, 1924.
7. *W. Pauli*, *Z. Physik* **36**, 336, 1926 és *Magyar Fizikai Folyóirat* **14**, 272, 1966.
8. *E. Wigner*, *Z. Physik* **43**, 624, 1927 és *Magyar Fizikai Folyóirat* **12**, 85, 1964.
9. *E. Wigner*, *Gruppentheorie und ihre Anwendung auf die Quantenmechanik der Atom-spektren*, Vieweg, Braunschweig, 1931.
10. *V. Fock*, *Z. Physik* **98**, 145, 1935.
11. *V. Bargmann*, *Z. Physik* **99**, 578, 1936.
12. *L. Hulthén*, *Z. Physik* **86**, 21, 1933.
13. *Sz. P. Allilujev*, *ZsETF* **33**, 200, 1957 és *Soviet Phys. JETP* **6**, 156, 1958.
14. *G. Györgyi és J. Révai*, *ZsETF* **48**, 1445, 1965. és *Soviet Phys. JETP* **21**, 967, 1965.
15. *M. Born és P. Jordan*, *Elementare Quantenmechanik*, Springer, Berlin, 1930, 177. old.
16. *J. M. Jauch és E. L. Hill*, *Phys. Rev.* **57**, 641, 1940.
17. *A. W. Sáenz*, *Michigan University thesis*. 1949.
18. *L. D. Landau és E. M. Lifshitz*, *Mechanics*, Pergamon, Oxford, 1940, 39. old.
19. *D. Park*, *Z. Physik* **159**, 155, 1960.
20. *L. C. Biedenharn*, *Journ. Math. Phys.* **2**, 433, 1961.
21. *M. Moshinsky*, *Phys. Rev.* **126**, 1880, 1962.
22. *L. C. Biedenharn*, *Lectures delivered at the Summer Institute for Theoretical Physics, University of Colorado, Boulder, 1962. New York, 1963*, 384. old.
23. *J. Schwinger*, *Journ. Math. Phys.* **5**, 1606, 1964.
24. *P. J. Redmond*, *Phys. Rev.* **113**, B 1352, 1964.
25. *F. Schweiger*, *Acta Phys. Austriaca*, **17**, 343, 1964.
26. *F. Schweiger*, *Acta Phys. Austriaca*, **19**, 138, 1964.
27. *R. U. Sexl*, *Acta Phys. Austriaca*, **22**, 161, 1965.
28. *T. Shibuya és C. E. Wulfsman*, *Am. Journ. Phys.* **33**, 570, 1965.
29. *L. C. Biedenharn és P. J. Brussaard*, *Coulomb Excitation*, Clarendon, Oxford, 1965.

30. F. Schweiger, *Acta Phys. Austriaca*, **21**, 389, 1966.
31. A. M. Perelomov és V. Sz. Popov, *ZsETF* **50**, 179, 1966.
32. H. Bacry, *Nuovo Cimento* **41 A**, 222, 1966.
33. A. O. Barut, P. Budini és C. Fronsdal, *Proc. Roy. Soc. A* **291** 106, 1966.
34. E. C. G. Sudarshan, N. Mukunda és L. O'Raifeartaigh, *Phys. Lett.* **19**, 322, 1965.
35. N. Mukunda, L. O'Raifeartaigh és E. C. G. Sudarshan, *Phys. Rev. Lett.* **15**, 1041, 1965.
36. P. Budini, *Nuovo Cimento* **44 A**, 363, 1966.
37. M. Bander és C. Itzykson, *Rev. Mod. Phys.* **38**, 330, 346, 1966.
38. M. Y. Han, *Nuovo Cimento* **42**, B, 367, 1966.
39. R. H. Pratt és T. F. Jordan, *Phys. Rev.* **148**, 1276, 1966.
40. R. Musto, *Phys. Rev.* **148**, 1274, 1966.
41. J. A. Malkin és V. I. Manko, *Jagvernaja Fizika* **3**, 372, 1966.
42. A. O. Barut, *Phys. Rev.* **156**, 1538, 1967.
43. A. O. Barut és H. Kleinert, *Phys. Rev.* **156**, 1541, 1967.
44. A. O. Barut és H. Kleinert, *Phys. Rev.* **157**, 1180, 1967.
45. A. O. Barut és H. Kleinert, *Phys. Rev.* **160**, 1149, 1967.
46. C. Fronsdal, *Phys. Rev.* **156**, 1665, 1967.
47. Y. Nambu, *Progr. Theoret. Phys. (Kyoto), Suppls.* **37 & 38**, 368, 1966.
48. Y. Nambu, *Phys. Rev.* **160**, 1171, 1967.
49. Y. Nambu, Talk at the International Theoretical Physics Conference on Particles and Fields, Rochester, 1967, EFINS-67-80.
50. K. B. Wolf, *Supplemento al Nuovo Cimento* **5**, 1041, 1967.
51. G. Györgyi, *Nuovo Cimento* **53 A**, 717, 1968 és *Magyar Fizikai Folyóirat* **17**, 39, 1969.
52. G. Györgyi, *Nuovo Cimento* **62 A**, 449, 1969.
53. G. Györgyi, *Acta Phys. Ac. Sci. Hung.* **27**, 435, 1969.
54. G. Györgyi és S. Kövesi-Domokos, *Nuovo Cimento* **58 B**, 1919, 1968.
55. Györgyi G., *Magyar Fizikai Folyóirat* **17**, 459, 1969.
56. E. Schrödinger, *Proc. Roy. Irish Acad.* **46 A**, 9, 1940.
57. L. Infeld és T. E. Hull, *Reviews of Modern Physics* **23**, 21, 1951.
58. L. A. Pars, *A Treatise on Analytical Dynamics*, Heinemann, London, 1965.
59. C. Lanczos, *The Variational Principles of Mechanics*, Univ. of Toronto Press, Toronto, 1949.
60. J. L. Synge, *Classical Dynamics*, *Encyklopedia of Physics*, III/1, Springer, Berlin, 1960.
61. P. A. M. Dirac, *Can. Journ. Math.* **2**, 129, 1950.
62. P. A. M. Dirac, *Lectures on Quantum Mechanics*, Belfer Graduate School, New York, 1964.
63. Györgyi G., *kandidátusi értekezés* 1964, *Magyar Fizikai Folyóirat* **15**, 505, 1967.
64. H. Weyl, *Z. Physik* **47**, 1, 1928.
65. A. O. Barut és E. C. Phillips, *Comm. Math. Phys.* **8**, 52, 1968.
66. C. Itzykson, *Journ. Math. Phys.* **10**, 1109, 1969.
67. N. Mukunda, *Journ. Math. Phys.* **10**, 2086, 1969.
68. Végső L., *diplomamunka* 1970.
69. I. A. Malkin, V. I. Manko, *preprint No 128*, Lebedev Institute.
70. J. P. Dahl, *Physics Letters* **27A**, 62, 1968.
71. J. P. Dahl, *Kongelige Danske Videnskabernes Selskab*.
72. M. Berrondo és H. V. McIntosh, *Journ. Math. Phys.* **11**, 125, 1970.
73. C. Fronsdal, *Phys. Rev. DIII* **3**, 1299, 1971.
74. J. Lánik, *Czechoslovak Journ. of Phys. B* **19**, 1540, 1969.
75. A. Norcliffe és I. C. Percival, *J. Phys. B* **1**, 784, 1968.
76. A. Norcliffe, I. C. Percival és M. J. Roberts, *J. Phys. B2*, 578, 1969.
77. V. Sz. Popov, *Talk at the International School for Theor. Phys., Yalta, 1966. Naukova Dumka, Kiev, 1967.*
78. H. Bacry, *Talk at the Theoretical Physics Institute, Univ. of Colorado, 1966.*
79. H. Bacry, *Leçons sur la Théorie des Groupes*, Gordon & Breach, Paris, 1967.
80. *Third Annual Report, International Centre for Theoretical Physics, Trieste, 1967.*
81. C. E. Wulfman, *Group Theory and Coulomb Systems*, megjelenőben.

MAGYAR
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
KÖNYVTÁRA

Technikai szerkesztő: Turchányi György
A kiadásért felel az Akadémiai Kiadó igazgatója — Műszaki szerkesztő: Helle Mária
A kézirat beérkezett: 1971. XI. 26. — Terjedelem 8,4 (A/5) ív
71-6156 — Szegedi Nyomda

A MAGYAR
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
MATEMATIKAI ÉS FIZIKAI TUDOMÁNYOK
OSZTÁLYÁNAK

KÖZLEMÉNYEI

Matematikai, fizikai, csillagászati dolgozatokat, referátumokat, könyvismertetéseket, a Tudományos Minősítő Bizottságnak a III. Osztályra vonatkozó híreit s a III. Osztály híreit közli. Évenként egy kötet (kb. 40 ív) jelenik meg (négy szám alkot egy kötetet).

A közlemények előfizetési ára kötetenként, azaz évenként 60 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, Budapest V., Alkotmány u. 21. Pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11 488, külföldi megrendelések a „Kultúra”

Könyv- és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat,
Budapest I., Fő utca 32.

(Pénzforgalmi jelzőszám: 218-10 990 útján eszközölhetők.)

Ára 10,—Ft.

Előfizetés kötetenként 48,—Ft.

INDEX: 26 491

TARTALOMJEGYZÉK

	olda
<i>Tarnóczy Tamás</i> : A beszédkórus módszer	105
<i>Genevieve Godefroy</i> : A Dijon-i Természettudományi Kar Dielektrikumok és Ferroelektromos Anyagok Laboratóriumának tevékenysége	129
<i>Györgyi Géza</i> : Dinamikai szimmetriák. A $-\frac{1}{r}$ potenciál	163

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

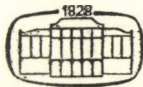
A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR,
PÁL LÉNÁRD ÉS SZALAY SÁNDOR
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI
JÁNOSSY LAJOS

XX. KÖTET

3. FÜZET



AKADÉMIAI KIADÓ
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
BUDAPEST 1972

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: BUDAPEST V., ALKOTMÁNY UTCA 21. SZ.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A klasszikus irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikkeket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10—10 dolgozat megjelenése után a folyóiratfüzetekről leválasztva, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóiratból évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 ív terjedelemben.

A kéziratok a következő címre küldendőek:

Jánossy Lajos akadémikus
Budapest, XII., Konkoly Thege út
Központi Fizikai Kutató Intézet

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként 48 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó. Budapest, V., Alkotmány utca 21. pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11 248. külföldi megrendelések a „Kultúra” Könyv- és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat, Budapest, I., Fő utca 32. (Pénzforgalmi jelzőszám: 218-10990) útján eszközölhetők.

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmi ismertetőt írnak.
2. A levezetéseknek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közölik. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázószöveget írnak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak sedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.

MAGYAR
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
KÖNYVTÁRA

A BESZÉD ÁTLAGOS ENERGIASZÍNKÉPE HAT NYELV ALAPJÁN*

TARNÓCZY TAMÁS

MTA Akusztikai Kutatócsoport, Budapest

A beszédkórus módszerrel több nyelvre vizsgáljuk a beszéd átlagos energiaszínképét. Összefüggést mutattunk ki a színkép alakja és a kórus neme, a beszélt szöveg erőssége és iránya között. Következtetéseket vontunk le a hangfelvétel és dinamikasabályozás helyes megoldására. Hat európai nyelv átlagos energiaszínképe alapján az állapítható meg, hogy az eltérés közöttük aránylag kicsi és csak a 800...2500 Hz sávban jelentkezik. Végül megmutatjuk, hogy módszerünk az egyéni beszéd színkép és az átlagos zenei energiaszínkép meghatározására is alkalmas.

Bevezetés

Egy korábbi közleményben [1] ismertettük a beszédkórus-tétel igazolását, amely szerint több személy egyidejű beszéde sztochasztikus, zörejjellegű hangjellé összegeződik, amely szűrőkörös eljárással elemezhető, az elemzés eredménye azonos a beszéd hosszú időre átlagolt energiaszínképével.

A beszédkórus-tétel gyakorlati jelentősége, hogy olyan mérés technikai eljárást ad a kezünkbe, amelynek segítségével gyorsan, pontosan és aránylag egyszerű mérőberendezéssel határozhatjuk meg valamely csoport beszédének átlagos energiaszínképét. Az első közlések [2] óta a módszert más szerzők is átvették, és azt emelik ki benne, hogy egyaránt megszünteti az egyetlen színkép meghatározásához szükséges hosszú idejű integrálásnak és az egyes személyek által szolgáltatott színképek átlagolásának szükségességét [14, 15, 20, 23].

1. Kísérleti technika

1.1 A kísérletek elvégzésének módja a következő. A felvételt valamilyen speciális akusztikai helyiségben (stúdió, sűket szoba) készítjük. A beszédzörej sztochasztikus voltának legfontosabb előfeltétele, hogy egyetlen személy hangja se legyen kitüntetett a többiekével szemben, és hogy az egyes személyek által mondott szövegek statisztikailag függetlenek legyenek egymástól. A kísérletek során mindkét feltételt teljesítésére nagy gondot fordítottunk.

Az első feltétel megvalósítása érdekében minden egyes személlyel előzetes mikrofonpróbát tartottunk. A beszéd átlagos szintértékét a stúdiótechnikában szokásos nagy időállandójú vezérlésmérő műszeren ellenőriztük és mindenkinek a hangját külön-külön azonos átlagos szintre hoztuk. A szint egységesítéséhez nem a beszélő hangját halkítottuk vagy erősítettük, mert ezáltal a hang színezete is változott

* Érkezett 1969. szeptember.

volna. Először megkértük, hogy a mikrofontól pl. 50 cm távolságban „normális” beszédhangerővel beszéljen. Ha a vezérlésmérő kis eltérést mutatott az előre megállapított átlagos szinttől, a mikrofon saját erősítőjének szabályozójával hoztuk helyre a hibát. Ha az eltérés 2...3 dB-nél több volt, a beszélőt a mikrofonhoz közelebb vagy attól távolabb vezényeltük, hogy a kívánt szintet elérjük. Egy-mikrofonos felvétel esetén csak az utóbbi szabályozási lehetőség jöhet számításba.

Amikor egyénileg már minden hangerőt beszabályoztunk, szólaltattuk meg egyszerre az összes beszélőt. Az előzetes beszabályozás ellenére is ilyenkor megeshet, hogy egyes személyek hangja a kórus zajából kiemelkedik. Ennek fizikai oka (pl. különleges hangszín), vagy pszichológiai oka (pl. hangosabb beszéd a környezeti zaj hatására) is lehet. Az első esetben leghelyesebb a különleges hangszínű személyt a kórusból kiemelni, a másodikban rövid begyakoroltatás segít a bajon.

A statisztikus függetlenség biztosítása érdekében a kísérletek során a kórus minden tagja más-más szöveget olvas föl. A szövegek megválasztásában mindig ügyeltünk arra, hogy idegen és nehéz szavak ne forduljanak elő, a szövegekben egyazon szó vagy kifejezés ne sokszor ismétlődjék, a szöveg ne legyen ritmikus, stb. Kértük, hogy a beszélők lehetőleg gyorsan mondják a szöveget, különlegesen ne hangsúlyozzanak, hosszú szüneteket ne tartsanak, és hibás olvasás esetén ne álljanak meg, hanem javítás nélkül haladjanak tovább.

A statisztikus függetlenség érdekében a kísérletek korábbi csoportjaiban minden személy külön mikrofonba beszélt, sőt a beszélők fülüket kísérletképpen vattával is betöltötték, hogy egymást ne zavarják. A kísérletek során azonban kiderült, hogy sem a külön mikrofonba, sem a fülbedugásra nincs szükség a kívánt zavartalanság eléréséhez, helyette inkább némi összegyakorlás szükséges.

Az első kísérleteket egy a Magyar Rádió 2400 m³ térfogatú stúdiójában végeztük 10 külön mikrofonnal. Több változaton át végül eljutottunk a süket szobában elhelyezett egyetlen mikrofonos méréshez, amely az előbbivel teljesen azonos színeképi adatokat eredményez. Mindkét eljárás rendelkezik bizonyos előnyökkel. Kétségtelen, hogy a külön mikrofonos mérés jobban biztosítja a beszélők zavartalanságát — különösen gyakorlatlan kórustagok esetén. Viszont a mikrofonok összeválogatása sokszor nehézséget okoz. Azonos típusú mikrofonok átviteli jelleggörbéje közel azonos, a szükséges korrekciókat ilyen esetben pontosabban el tudjuk végezni. A mikrofonok számának redukciója során közbeeső lépésként 8-as jelleggörbéjű mikrofonokhoz 2—2 szembeálló párt állítottunk. Ezzel a módszerrel a kórus létszáma emelhető. A legnagyobb létszámú kórusfelvétel a Magyar Hangfelvevőgyártó Vállalat 2500 m³-es zenei stúdiójában 1962-ben készült 7 mikrofonnal (14 személlyel).

1.2 A mikrofonok jelleggörbéjének korrekcióba vétele szempontjából az egy-mikrofonos mérés a legelőnyösebb. 1962 utáni vizsgálataim során az egy-mikrofonos megoldás mellett döntöttem, ami nemcsak a jelleggörbe egyszerűen figyelembe vehető volta miatt előnyös, hanem azért is, mert a mérésekhez nincs szükség nagy stúdióra és sok berendezésre. Kisméretű süket szoba és a mérésekhez szükséges berendezés minden akusztikai laboratóriumban megtalálható. További fontos előny, hogy a süket szoba alapzaja lényegesen kisebb, mint a hangfelvételi stúdióké. Az egy-mikrofonos mérés hátránya, hogy korlátozza a kórus létszámát; 8 személynél több nem állítható a mikrofon köré.

A saját laboratóriumunkban végzett egy-mikrofonos mérésekhez mindig Brüel-és Kjaer-féle 4131 típusú mikrofont használunk. Az összes mikrofon-tulajdonságot figyelembe véve ez a típusú mikrofon tekinthető ma a legjobbnak [3]. A kísérleteknél

a védőrács a mikrofonon volt és a hang beesési szöge 90° volt. Emellett a szög mellett lehet a mikrofont több személynek egyenlő föltételek mellett körülállni: az irányjelleggörbe ugyanis a mikrofon membránjával összeeső síkban minden frekvenciára pontosan kör.

A felvétel készítésének további eszközei az erősítők és a mágneses feljegyző-lejátszó berendezés. Az erősítők ellenőrzése aránylag egyszerű föladat és ezek sohasem okoztak korrekciós gondot. Szalagjátszók tekintetében az elmúlt 15 esztendő jelentős változásokat hozott. A mérésekhez mindig a technika akkori állásának megfelelő minőségű berendezést és szalagot használtuk. Az első méréseknél még 76 cm/s szalagsebességű Tolana és EMI magnetofonok szerepeltek, a szalag pedig Agfa CH jelű volt. Közben dolgoztam Telefunken és Ampex gépekkel is. Legújabban nagyon jól bevált a Mechanikai Laboratórium (Budapest) STM 200 típusú 38/19 cm/s sebességű mágneses rögzítője, amelyhez BASF vagy Scotch szalagot használunk.

1.3 Az alapzaj értékét a stúdió teremzaj, az elektronikus eredetű és a mágneses szalag okozta zörejek együttesen határozzák meg. Ennek a zörejszerű zajnak a színképét — amennyiben lehetséges volt — több alkalommal is lemértem. A zavaró zaj színekpe egyenletesen eső jellegű és a férfi beszédzörej színképét 63 Hz-nél és 12 500 Hz-nél keresztezi. Kritikus sávszintekbe átszámítva — ami a hangosság szint görbéekkel közvetlenül összehasonlítható — az átlagos zajszínekpe nagyjából a 15...20 phonos görbék menetét követi [4]. A süket szobás egy-mikrofonos beszédkórus felvétel alapzaj szempontjából előnyösebb a stúdióban készített több-mikrofonos felvételnél.

Nem tekinthető alapzajnak, de zavarhatja a méréseket a mikrofon áthallása, vagy a visszaverődött hangjelek vétele. Sok-mikrofonos kísérleteink során —20... —25 dB áthallási értékeket mértünk. Ez — a szélső frekvenciahatárok kivételével — még akkor sem volna zavaró, ha az áthallott színekpe más volna, mint a mikrofonba mondott közvetlen hangé. Esetünkben azonban közel azonos színekpekről van szó, zavarás tehát nem állhat fenn. A visszaverődésekkel csak akkor adódik probléma, ha süket szobában, mikrofonnak háttal vagy oldalt állított beszélőkkel a hátrasugárzás vagy oldalirányú sugárzás színekpét vizsgáljuk. Jó elnyelésű határfelületek mellett az egész mély hangok kivételével itt sem jelentkezik lényeges zavar.

A jel/zaj viszony további növelése csak a beszédkórus létszámának emelésével volna megvalósítható. Az így nyert előny azonban jelentéktelen (10 helyett 20 fő 3 dB jelszint-növekedést okoz), amellett alig bővíti a színekpről nyerhető ismereteinket.

1.4 Az elemzés kísérleti technikájául a frekvenciával arányos sáv szélességű szűrők egymásutáni alkalmazását választottuk. Erre a viszonylag rövididejű és kényelmes elemzési lehetőség mellett további indok, hogy a hangosság helyes értéklése érdekében lehetőleg igazodnunk kell a hallás összefoglaló frekvenciacsoportjaihoz. Ezek az ún. kritikus sávok 315...400 Hz fölött nagyjából $1/4...1/3$ oktáv szélességűek, alatta állandó 100 Hz szélességet foglalnak el.

A terc sáv szélesség ($1/3$ oktáv = a középfrekvencia 23%-a) 315 Hz fölött jó közélítéssel alkalmazkodik a kritikus sávokhoz, a jelzett határérték alatt ezeknél keskenyebb. Az alsó tercsávok viszonylagos keskenysége nagyobb frekvenciabontást eredményez, ami célunknak azért megfelelő, mert éppen erre a területre esnek a beszédhangok alapfrekvenciái és első felhangjai. A beszédzörej színekpe itt még nem egyértelműen folytonos, alakulásának pontosabb megismeréséhez tehát szükség van

a keskenysávú fölbontásra. Pontosabb elemzési élesség viszont nem célszerű, mert az alaphang és az első felhang úgyis oktáv távolságra van egymástól.

Az elemzés alsó határfrekvenciájára vonatkozó gyakorlati megfontolások a következők: a) a férfi beszéd legmélyebb alaphangja 80...100 Hz és b) a zajszint 50 Hz-en már fölülmúlja a jelszintet. Terc-szűrős elemzés esetén a legalsó sáv középértékét tehát $\nu_0 = 63$ Hz-nek választjuk, az ehhez tartozó sáv szélesség: $B \sim 15$ Hz. A felső határsáv hasonló megfontolások alapján: $\nu_0 = 12\,500$ Hz és $B \sim 2875$ Hz.

Az első mérések során az elemzéshez oktáv- és féloktáv-szűrőket használtunk (Siemens, Rohde és Schwarz) és az energiaszinteket fél-oktávonként határoztuk meg. Még 1956-ban áttértünk a Brüel és Kjaer 2109 típusú tercszűrős elemzőre, majd 1960 óta a 2112 típusú berendezést használjuk.

A sűrűségi színek meghatározásához végtelen sok végtelen keskeny sáv szélességű szűrő, az időbeli átlagoláshoz pedig végtelen hosszú idő lenne szükséges. A valóságban a lehetséges megközelítések természetesen bizonyos hibával járnak, amelynek taglalása helyett az irodalomra utalunk [5, 6]. Az elemzési sebesség

$$dv/dt = 4B^2\varepsilon^2 \quad (1)$$

ahol ε az amplitúdó megengedett relatív ingadozása. A teljes elemzési idő ebből

$$T^* = \int_{\nu_a}^{\nu_b} \frac{dv}{4B^2\varepsilon^2} = \int_{\nu_a}^{\nu_b} \left(\frac{\nu}{B}\right)^2 \frac{1}{4\varepsilon^2} \frac{d\nu}{\nu^2} \quad (2)$$

Terc-szűrős elemzéssel számolva $B/\nu \sim 23\%$, és engedjük meg 5%-os amplitúdó-ingadozást, továbbá végezzük az elemzést $\nu_a = 63$ Hz-től $\nu_b = 12\,500$ Hz-ig. Ekkor az elemzési idő

$$T^* = \int_{63}^{12\,500} \left(\frac{\nu}{B}\right)^2 \frac{1}{4\varepsilon^2} \frac{d\nu}{\nu^2} = \left| \left(\frac{\nu}{B}\right)^2 \frac{1}{4\varepsilon^2} \frac{1}{\nu} \right|_{63}^{12\,500} = \frac{1}{21,2 \cdot 10^{-4} \cdot 63} = 7,5 \text{ s}$$

A felső határ behelyettesítése jelentéktelen igazítást adna. A számításból látható, hogy az elemzés időtartamát állandó sávarányú szűrők esetén a legalsó sáv szélessége szabja meg.

Külön indokolni kell, hogy szintíró mérés esetén miért az amplitúdó megengedett hibája szabja meg az elemzési időt és miért nem az intenzitás. A szintíróban nincs négyzetre emelő tag. A logaritmikus átalakító potencióméter segítségével az írószerkezet magának az amplitúdónak a logaritmusát jegyzi föl, vagyis ezáltal a szintíró amplitúdó-följegyző berendezésként értékelendő és így az amplitúdó ingadozásra vonatkozó statisztikus hibát kell figyelembe vennünk.

A kísérletek során kizárólag óvatosságból a legalsó sávra előbb kiszámított időértéket 10 s-ra emeltem és minden elemzési sávban ugyanekkorának tartottam. A használt 24 terc-szűrővel 63...12 500 Hz között így összesen $240 \text{ s} = 4$ perc egy teljes színeképelemzés ideje.

Az átlagolási idő a szintíró írássebességével is szabályozható. A tulajdonképeni átlagolás teljes folyamata

$$A = \frac{1}{T_2} \int_0^{T_1} \sqrt{\frac{1}{T_1} \int_0^{T_1} f(t)^2 dt_1} dt_2 \quad (3)$$

képlet szerint alakul [10]. Itt T_1 az egyenirányító kör RC-tagjának időállandója, T_2 pedig az írószerkezet mozgékonyasága által meghatározott időállandó. Kimutatható, hogy amíg $T_1 \cong T_2$, a műszer a valóságos effektív értéket méri. Az egyenirányító kör belső adatai miatt tehát az írószerkezet időállandóját kicsinek kell választanunk, viszont az írás stabilitása miatt a nagyon gyors ingadozás lehetőségét is ki kell kerülnünk. Broch és munkatársai [6, 7] végigvizsgálták a lehetőségeket és arra az eredményre jutottak, hogy 50 dB-es potencióméter használata esetén, 50 Hz alsó határfrekvencia és 500 mm/s írássebesség beállítása mellett a $T_1 \cong T_2$ feltétel is és a stabilitás is teljesül. Ekkor az effektív átlagolási idő $T=200$ ms. Saját szintdiagramjaink készítéséhez általában ezt a beállítást használtuk.

1.5 A vázolt elemző berendezésekkel végül megkaptuk az egyes szűrőszávokba eső energia-ingadozás szintdiagramját. Az egyes középértékek meghatározása után az eredményeket a frekvencia függvényében színekvonal szintben ábrázoljuk. Az egyes tercsávokba eső ingadozás mértéke természetesen nagyobb, mint a teljes szint ingadozása. A középérték pontos kiszámítására ezért többször grafikus integrálást végeztünk. Kisebb mérvű vagy nagyobb, de egyenletes ingadozás esetén a szemmel való becslés $\pm 0,5$ dB pontossággal sikerül. Az elemzés összes hibáját a kisfrekvenciás energia-ingadozás

$$\varepsilon = \frac{\sigma}{E} = \frac{1}{\sqrt{BT}} \quad (4)$$

relatív négyzetes eltérés jellemzi, ami a legalsó sávban a legkritikusabb. A (4) egyenletben σ az energia-ingadozás standard deviációja, E az energia középértéke, B az aktuális szűrő sáv szélessége és T az elemzési idő. Mivel a följegyzési (elemzési) időt minden sávban azonosnak (10 s) tartjuk, ez a fajta hiba a frekvenciával csökken: 6300 Hz-nél az alsó sávnak már csak tizedrésze. Világos tehát, hogy az alsó sávokban pontatlanabb közepeléssel is megelégedhetünk, de a felső sávokban helyesebb grafikus integrálni.

A színekpek ábrázolásának egyik lényeges feladata, hogy a kapott eredmények mindig összehasonlíthatók legyenek. Másképpen fogalmazva: világosan és jól kell meghatároznunk a 0-szint értékének rögzítését. A leghelyesebbnek az látszik, hogy a normális hangerősségű beszéd teljes szintje legyen a 0-szint. Ekkor, attól függően, hogy a színekpek maximuma milyen frekvenciasávba esik és milyen éles, a normális hangerejű beszéd színekpcscúcsai $-23 \dots -26$ dB/Hz közé esnek. Ha ehhez képest jelezni akarjuk más beszéderősség színekpének eltolódását, mindegyikre megtartjuk az előbb rögzített 0-szintet. Ekkor pl. a kiabált beszéd színekpcscúcsa -15 dB/Hz-re, a mormolt beszéd pedig -35 dB/Hz-re esik.

Ha azonban a színekpek alakját akarjuk összehasonlítani tekintet nélkül relatív szintjükre, a mindenkori teljes szintet kell 0-szintnek tekintenünk. Ez nagyon helyes elv, ha pl. különböző hangcsoportok, nemek, vagy nyelvek szerint összeállított kórusok beszédzörejének színekpét kívánjuk összehasonlítani. Így az esetleges hangerebeli különbségek nem tolják el lényegesen a színekpeket.

Nem helyes tehát különböző szerzők eredményeinek összehasonlításakor egyszerűen a színekpek valamelyik részét — akár a maximumát is — azonos szintre hozni. A pontos összehasonlításhoz ismerni kell a teljes szintet és a választott 0-szintet. Ezeket az adatokat a legtöbb szerző nem közli, s ezért a különböző alaki színekpek közvetlen összehasonlítása ritkán meggyőző.

2. Pontosság és megismételhetőség

2.1 A beszédkórus elemei statisztikus függetlenségének biztosítására nincs szükség különleges kísérleti körülményekre.

Ez a kijelentés nem magától értetődő. Az első kísérleteknél még arra is gondoltunk, hogy minden beszélő külön kis stúdióban olvassa föl a szövegét. Végül is a nagy közös stúdió látszott technikailag inkább megvalósíthatónak. A mérések során a külön-külön mikrofonba beszélő személyek közötti átlagos távolság 3–4 m volt. Az egyes mikrofonok között – 20 dB áthallás mutatkozott, de a beszélő személyek rövid gyakorlás után egyáltalán nem zavarták egymást. A fülbe helyezett vattadugót az első kísérletek után (1954-ben) kivettük és többet nem alkalmaztuk. Fülbedugásra még egyszer sor került (New York, 1965), amikor egy-mikrofonos mérés alkalmával viasz fülugót használtunk, de itt sem mutatkozott a kétféle állapothoz tartozó színeképek között a szórási határon kívül eső különbség. Női kórustagoknál a kellő gyakorlás miatt egyszer-kétszer előfordult (pl. orosz beszédkórus Budapesten, 1966), hogy a szövegmondás közben nevetni kezdtek. Ha ezt nem sikerült megszüntetni, az ilyen beszélőket a kórusból kiemeltük.

2.2 A beszédkórus létszámának 8...10 személy fölé emelése az eredmények pontosságát már nem növeli

Kísérleteim során az elemzésre kerülő felvételek legkisebb létszáma 6 fő, legnagyobb létszáma 14 fő volt. Több személy bevonása technikai nehézséget jelentene, és a kísérletek eredményei szerint nincs is szükség rá.

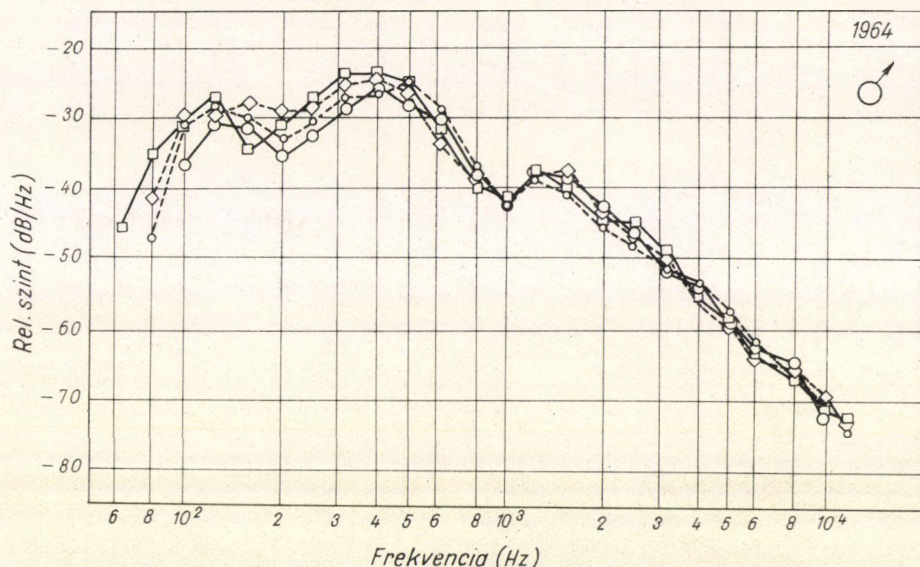
Ennek igazolására a következő két kísérletet végeztük. Egy 10-tagú kórus beszédzörejéről fölvett mágneses szalagot két részre vágtunk és egy harmadik szalagra összemásooltuk. A másik kísérlet során ugyanezt két különböző beszédkórus felvételével is megcsináltuk. Az eredő beszédzörej hallásra homogénebbnek hatott, de a 10 s-os elemzések eredményeiben az eredetiekhez képest nem mutatkozott szignifikáns eltérés.

A meghallgatott beszédzörej „homogenitása” azért nem jellemző az átlagos energia-színeképre, mert a fül csak a saját 50 ms-os időállandójával „közepel”, míg a mérést minden sávban 10 s időintervallumban hajtottuk végre.

2.3 Azonos beszédkórus különböző időpontban vett mintafüggvényeinek elemzése 630 Hz alatt ± 3 dB, 630 Hz fölött $\pm 1,5$ dB pontossággal azonos energia-színeképet eredményez.

Ezt a fajta ellenőrzést majdnem minden kísérlet során elvégeztem. Egy-egy kórusról általában 50...100 s időtartamú beszédzörej felvételt készítettünk, úgy hogy bőven volt lehetőség 10 s-os elemzendő darabok kiválasztására. Hosszabb felvétel nem szokott sikerülni. A beszélők „kifulladásá” miatt másfél perc után a jelfüggvény kevésbé egyenletes, a középérték pedig némileg esik, tehát a 90 s utáni részek már nem alkalmasak az összehasonlításra. Ugyancsak használhatatlan szokott lenni a felvétel első 10 s-a is, részben az indulás bizonytalansága miatt, részben pedig, mert a kezdés utáni első lélegzetvétel ideje még eléggé összeesik. Legmegfelelőbb az egyes vizsgálandó darabokat a 10...80 s közti részből választani.

Megállapításunk igazolására példaként az 1. ábrát mutatjuk be. A beszédkórus 8 férfi tagból állt. A mérés 1964-ben folyt egy mikrofonnal (Brüel és Kjaer 4131 típusú), az Akusztikai Kutatócsoport kisméretű süket szobájában. Az ábrán látható négy elemzés nem is egyazon felvétel különböző darabjairól készült, hanem a beszédkórus négy különböző felállása mellett készített felvételekről.



1. ábra. Nyolc férfi magyar nyelvű beszédkórusáról készült négy különböző színekép. A felvételek a kórus négy különféle fölállása mellett készültek. Egy-mikrofonos felvétel süket szobájában.

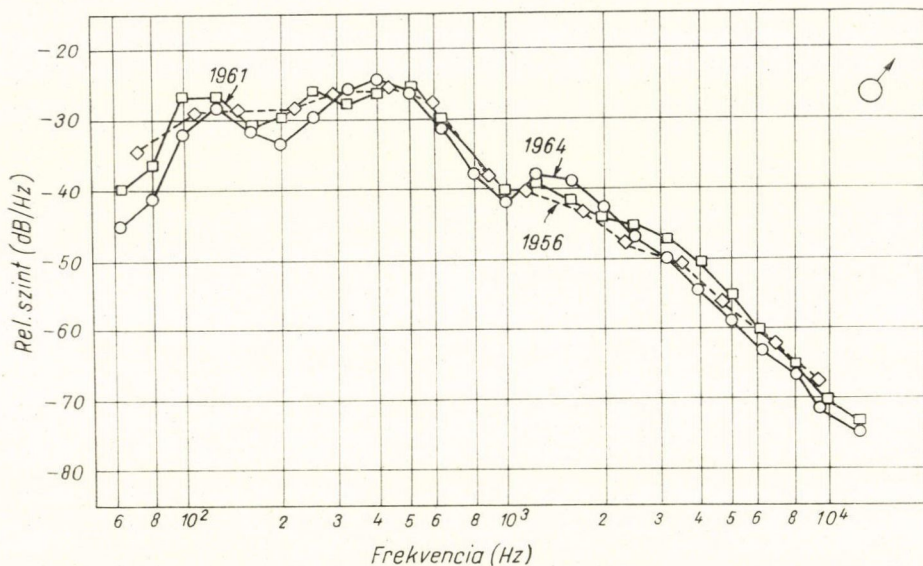
Az 1. ábra egyúttal azt is világosan szemlélteti, hogy a 63...315 Hz közötti színeképi tartomány változó viselkedése nem az elemzési, hanem a felvételi oldal rovására írható. A színekép e részének ingadozását elsősorban a hangerőnek és az alaphang magasságának változása okozza. A színeképek alakjának általános elemzésekor a szórás okainak magyarázatára még visszatérünk.

2.4 Azonos nyelven beszélő, azonos nemű csoportok minimálisan 8...10 személyes beszédkórusa 630 Hz alatt ± 4 dB, 630 Hz fölött ± 2 dB pontossággal azonos energiaszíneképet eredményez.

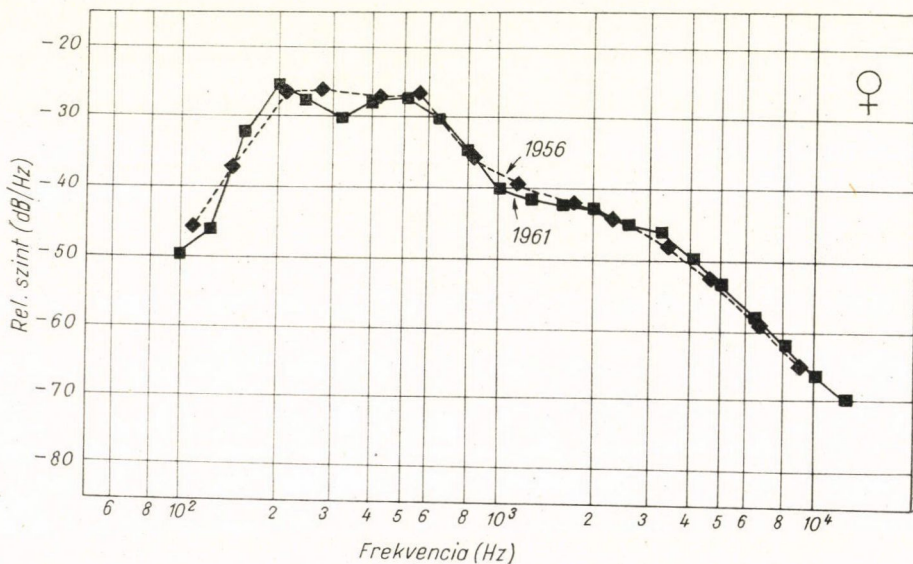
Ez a kijelentés valamivel többet mond az előbbinél. Ezúttal részben a mérési eljárás, nagyjából azonosban a beszélő személyek „mintavétele” okozta hiba lehetővé teszi vizsgálatuk. Kísérleti bizonyítására példaként a 2. és 3. ábrát közöljük.

A 2. ábra három különböző férfi beszédkórusról más-más időben készült beszédzörej felvétel színeképét tünteti föl. Az 1956 jelzésű azonos az 1954/55-ben készült és több helyen is közölt [2, 4] első méréssorozatokat 15 férfira vonatkozó átlagos eredményével. Megjegyzem, hogy ezeknél a méréseknél még nehezebb és pontatlanabb

méréstechnikával dolgoztunk, pl. az elemzést fél-oktávásávokban végeztük és a szint-író átlagolási idejét sem ismertük. Ennek a színeképnek a megbízhatósága 300 Hz alatt legalábbis vitatható.



2. ábra. Három különböző időben készült férfi beszédkorús színeképei.
Az adatokat lásd a szövegben.



3. ábra. Két különböző időben készült női beszédkorús színeképei.
Az adatokat lásd a szövegben.

Az 1961 jelzésű színekép 1960-ban készült 10 férfi beszédéről [8], az előzővel azonos helyen (a Magyar Rádió nagy stúdiójában), ugyancsak sok-mikrofonos eljárással, de más személyekkel. Ekkor már tercszűrős elemzést használtunk, de még a régi (2304 típusú) szintiróval dolgoztunk.

Az 1964 jelzésű színekép az 1. ábrán közölt négy elemzési eredmény középértéke. A három méréssorozatot 8 év időtávolságban, más-más mérési körülmények között és eszközökkel, azonkívül különböző létszámú és személyi összetételű beszédkórusokkal végeztem. Véleményem szerint a 2. ábra döntő súllyal esik latba a módszer pontosságának és megismételhetőségének megítélésében.

A 3. ábrán két méréssorozatot mutatunk be női beszédkórusokról. A jelzések a férfiakéval megegyező mérési adatokra utalnak. A görbék összeesésének az előző ábrák ismeretében nincs nagy jelentősége, de kiegészítésként közlése mégis helyesnek látszik.

3. A módszerrel elért legfontosabb eredmények

3.1 Normális hangerejű beszéd energia-színekpe a beszédkórus módszerrel 63... 12 500 Hz között egyértelműen meghatározható. A színekép három maximuma közül az első férfiaknál 100...125 Hz-re, nőknél 200—250 Hz-re, a második — legnagyobb értékű — egységesen 400...500 Hz-re esik. Egy harmadik, jóval kisebb értékű — esetleg elmosódott — maximum 1500 Hz környékén ismerhető föl. A színekép változása az első maximum alatt 24...28 dB/oktáv, a harmadik fölött pedig — 10...—12 dB/oktáv.

Az átlagos energia-színekép általános tulajdonságait főként a magyar felvételi és elemzési anyag kapcsán taglaljuk. Ez ideig 52 férfi és 36 nő magyar nyelvű beszédéről készítettünk egyenként vagy különböző csoportokban színeképet. A megállapítások egy része három nyelv színeképi anyagának birtokában 1964-ben egy G. Fanttal közösen írt dolgozatunkban [9] már közlésre került. A tárgyban írt utolsó összefoglaló jellegű dolgozatom 1964-ben jelent meg [10], az azóta végzett mérésekről itt számolok be először. Jelen értekezésben 6 nyelvre közlöm az energia-színeképeket, és ebben az anyagban a fenti megállapítással ellentmondó adat nem lelhető.

A mély hangok tartományában a színekép alakját elsősorban a vonalas szerkezet jellemzi. Az első maximum az alaphang magasságába esik, amely az 1—3. ábrákon világosan láthatóan férfiaknál 100...125 Hz, nőknél 200...250 Hz táján van. Ez alatt az érték alatt a színeképek a kis frekvenciák felé rohamosan esnek. Az esés mértéke 24...28 dB/oktáv, ami női színeképekben könnyebben határozható meg, mert a magasabb alaphang miatt jobb a jel/zaj viszony.

Az első maximum fölött fél oktávnyi távolságban előre megjósolhatóan minimumnak kell következnie a színeképekben, mert az alaphang és az első felhang közötti rész energiaszegény. A minimum természetesen az átlagos alaphang helyéhez igazodik, értéke pedig attól függ, hogy az alaphangok a kórusban hogyan szóródnak, ill. az integrálási idő alatt hogyan alakulnak.

A színekép e részének mintavételtől függő bizonytalansága nem kizárólag kórus-sajátság. Néha sikerült közel azonos hangfekvésű személyeket kórusba tömörítenünk, és akkor a minimum relatív értéke a —12...16 dB-t is elérte. Viszont egyetlen személy hangsúlyozott beszédében is megfigyelhető az alaphang állandó — nem egyszer egy oktávra széthúzó — magasság-ingadozása és ezáltal a minimum elmosódása. Próbálkoztam olyan kórusal is, ahol készakarva különböző hang-

fekvésű személyeket válogattam össze, sőt vegyeskórus felvételek is készültek. Ilyenkor a minimum teljesen eltűnt.

Nagyon éles minimum azért sem várható, mert a beszéd terc sávzsélességre eső zörejjösszetevőit is mérjük. A zörejhangok energiája a második maximumtól visszafelé számítva kisebb színeképesést kell, hogy eredményezzen, mint az első maximum alatt, tehát terc távolságra értelmezve jó esetben $-6...-8$ dB-es minimum várható.

A második maximum már nem pontosan az első felhang helyén keresendő, mert összeolvad a magánhangzók első rezonancia-helyével (formánshelyével), ami zömével $300...600$ Hz közé esik. A második maximumot, ami egyúttal a színekép abszolút maximuma, kivétel nélkül minden esetben $400...500$ Hz között találtuk meg.

A második maximumtól kezdve a színeképek nemtől nagyjából függetlenül alakulnak, mindössze egy kis eltolódás tapasztalható a nagyobb frekvenciák irányában a női hangok javára. A második maximum után a színekép esése elég meredek: $-14...-16$ dB/oktáv. Később látni fogjuk, hogy ez az érték, valamint egy második minimum és egy harmadik maximum helye, legalábbis nyelvcsoportonként specifikus. Érdekes, hogy amikor a stockholmi kutatók a zöngéhang (a hangszalagok létesítette gerjesztő hang) színeképi formáját kutatták, $900...1500$ Hz között szintén találtak egy gyöngye minimumot [11, 12]. Elképzelhető, hogy a második minimum a zöngéhang sajátságára [9], de valószínűbb, hogy a színekép esését a magánhangzók második nagy rezonancia-csoportja (formánshelye) szakítja meg, amely éppen 1000 Hz fölött kezdődik és a harmadik színeképi maximum nyilvánvaló okozója.

Az energiaszínekép felső szakasza $2000...2500$ Hz fölött alakul ki, ahol $-10...-12$ dB/oktáv színeképváltozás mérhető. Az idézett zöngévizsgálatok sajnos csak $2000...2500$ Hz-ig voltak elvégezhetőek (inverse filtering method). Ebben a tartományban a színekép esésére a korábbi dolgozatban [11] -12 dB/oktáv, a későbbiben [12] -17 dB/oktáv értéket állapítottak meg a szerzők. Az utóbbi esetben 2000 Hz-nél további minimum ismerhető föl és utána a görbe laposodik.

Saját adatainknak a hivatkozottakkal való összehasonlítása azt mutatja, hogy a beszéd energiaszíneképének 2000 Hz fölötti szakasza elsősorban a zöngéhang színeképének esési jellegét hordja magán, de erre a zörejhangok jellege szuperponálódik, ami a színekép esését kissé enyhíti.

3.2 A férfi és női beszéd energia-színeképe között lényeges különbség csak az alaphang hatásának tulajdonított első maximum és első minimum alakulásában mutatkozik. Különösen kiemelhető, hogy a színekép 2500 Hz fölötti eső része a két nemnél azonosan alakul.

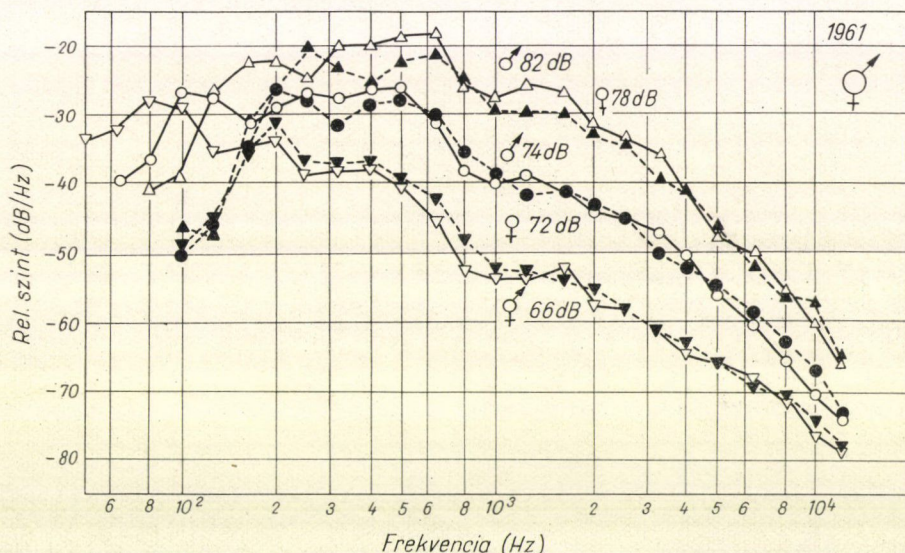
A férfi és női alaphangról mondottak a megállapítás első részét evidenssé teszik. A színekép eső részére vonatkozó megállapítással kapcsolatban némi megjegyzés kívánatos. A férfi beszédsszínekép általában 1600 Hz fölött, a női 2000 Hz fölött kezd esni. Az esés meredeksége nem éri el azonnal a végső értékét és a kétféle görbetípus csak 2500 Hz fölött fogadható el azonos meredekségűnek. Ez azonban nem jelent teljes összeesést, mivel általában a nők színeképe a férfiaké fölött halad. Az eltérés mégis olyan kicsi ($1...2$ dB), hogy aligha tekinthető jellegzetesnek.

Néhány alkalommal vegyes kórusral is dolgoztunk. Mint várható, ilyenkor az eredő színekép a két nemre jellemző színeképek közös burkolója. A vegyes színeképek felső szakasza valóban valamivel a férfi beszéd színeképe fölé kerül [2, 4].

3.3 A beszéderősség változásával a szinkép nem önmagával párhuzamosan tolódik el, hanem a szinkép-maximum helye körül átbillen. Hangosabb beszédnél a szinkép magasabb összetevőinek energiaszintje növekszik, mély összetevőie csökken. Halkabb beszéd esetén az átbillenés ellenkező értelmű. A legjellegzetesebb szinkép változás 1500 Hz környékén jelentkezik.

Az első részletes vizsgálatot, amely ezt a fölismerést tartalmazta, 1961-ben közöltem [8]. Az eredményeknek gyakorlati értékük is van, ezért a mérési módszerhez némi magyarázatot fűzünk.

A beszédhangerő előzetes beállítása után szalagra vettük a normális hangerejű beszédkórus beszédzörejét, majd a beállítás érintetlenül hagyása mellett fölszólítottuk a kórus tagjait, hogy saját megítélésük szerint ugyanazt a szöveget „halkan” olvassák fel. Végül a harmadik kísérletben az utasítás szerint „hangosan” mondták mikrofonba az anyagot.

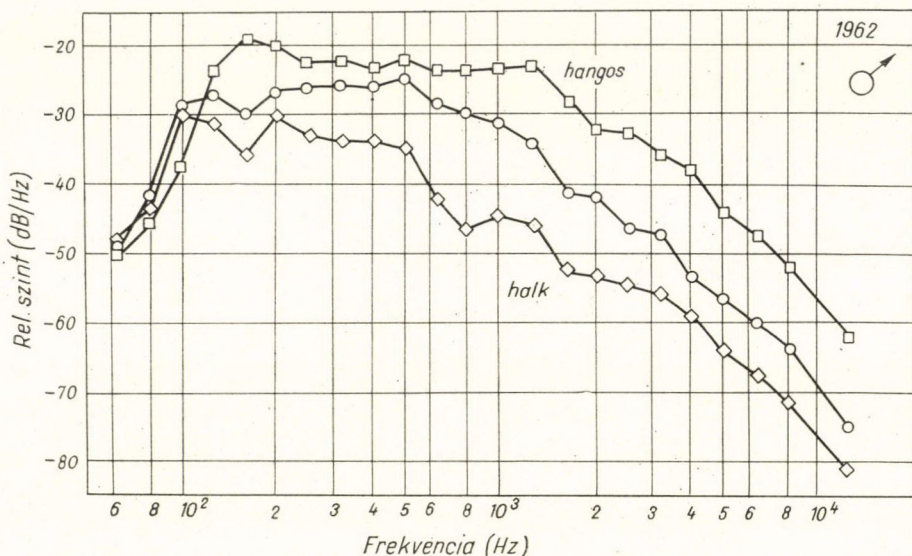


4. ábra. A halk, normális és hangos beszéd szinképei 10—10 tagú férfi, ill. női beszédkórusok alapján. Magyar nyelvű sok-mikrofonos felvétel stúdióban.

Elképzelésünk az volt, hogy normális hangerejéhez viszonyítva mindenki nagyjából azonosan ítéli meg saját halk és hangos beszédének relatív szintjét. Amellett a kórus átlagos hangereje is bizonyos értelemben „magával viszi” az egyéni beszéd hangerejét. Próbálkoztunk külön egyéni beállítással a halk és a hangos beszédre, de ekkor az eredmény kevésbé volt megbízható. Az összes kóruskísérlet alkalmával a felvételi beállítás mellett mindig megmértük a teljes szintet is. Így rendelkezésünkre állnak a különféle kórusok önmaguk által beszabályozott hangerősségértékei.

Az első kísérletek végeredménye magyar nyelvre a 4. ábrán látható. Mind a férfi, mind a női kórus 10 tagból állt, a felvételt a Magyar Rádió nagy stúdiójában készítettük 10 mikrofonnal. Érdekes, hogy a „normális” hangerő megítélésében a

nők egy kissé lejjebb esnek, ugyanakkor a „halk” beszéd teljes szintje mindkét nemre ugyanaz. Az természetesnek vehető, hogy „hangos” irányban fiziológiai okokból a női kórus a férfi hangerőhöz képest elmarad. Végül is a női dinamika-terjedelem 4 dB-lel kevesebb, mint a férfiaké, amely a halktól a hangosig 16 dB-t fog át. Az ábrába írt abszolút szintértékek egy személyre vannak átszámítva, a mikrofontól 30-cm-es beszélő távolságra.



5. ábra. Tizennégy férfi német nyelvű halk, normális és hangos beszédkórusáról készült szinképek. Hét-mikrofonos felvétel stúdióban.

Mivel a szinkép hangerővel való változására egyetlen nyelvvel végzett vizsgálatot nem tartottunk kielégítőnek, 1962-ben német anyaggal is kísérletet végeztünk [13]. Ezúttal 14 személyes férfi és női kórusok beszédzörejét vettük föl 7 mikrofonnal a Magyar Hanglemezgyártó Vállalat 2500 m³-es stúdiójában. A kísérleti személyek Budapesten tanuló német orvostanhallgatók voltak. A férfiakra vonatkozó mérés-sorozat eredményét az 5. ábrán, a nőkre vonatkozót a 6. ábrán az összehasonlít-hatóság érdekében újraközöljük.

Attól eltekintve, hogy a magyar és a német nyelvű szinképek között bizonyos különbségek tapasztalhatók — amire később még rátérünk —, a hangerővel való változás nagyjából követi az előbb megállapított szabályokat. Kivételt csak a férfiak „hangos” szinképe képez, amely 1000 Hz fölött a „normálissal” csaknem pontosan párhuzamosan fut, 200 Hz alatt pedig nagyon erős maximumot ér el.

Egyik érdekes mellékeredményként azt tapasztaltuk, hogy a kórus spontán megválasztott „normális” beszédhangerejének teljes szintje 3 dB-lel magasabb volt a magyar kórusokra kapott értékeknél. Ezzel arányosan alakult a többi teljes szint is, amint ezt az I. táblázatban följegyeztük.

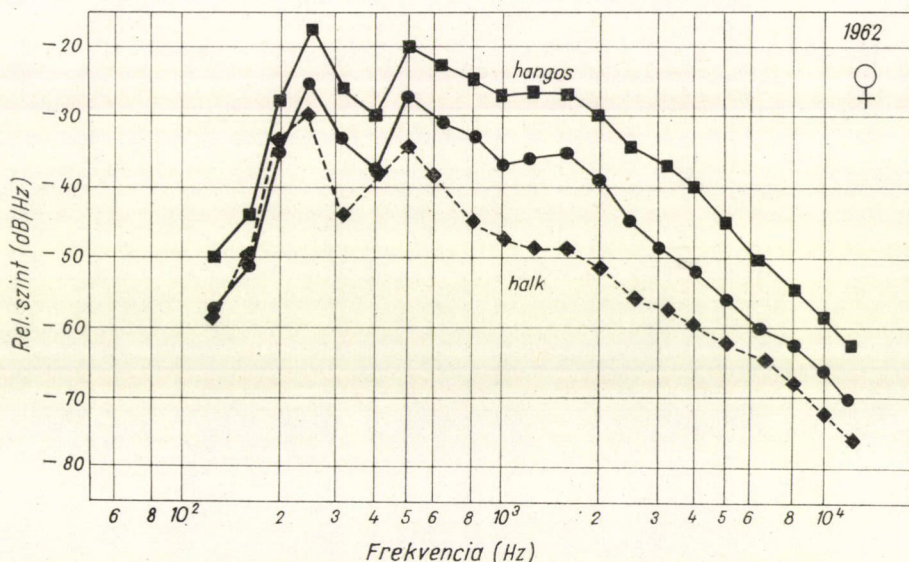
A kísérleteket az eredmények ellenőrzése és a jelenség további tisztázása érdeké-ben 1964-ben magyar nyelvre egy-mikrofonos méréssel megismételtük. Ekkor kis-

méretű süket szobában 8 férfi beszédkórusát vizsgáltuk. Ezúttal nem elégedtem meg három kategóriával, hanem a „mormolt” és a „kiabált” beszéd színeképet is meghatároztam. A süket szoba kis alapzaja és az egy-mikrofonos mérés előnye különösen a „mormolt” beszéd színeképének meghatározási lehetőségében mutatkozott meg. Ennek teljes szintje 11 dB-lel esett a normális hangerősség alá.

I. TÁBLÁZAT

Férfi beszédhangerő teljes szintértékei (dB) a beszéd hangossági foka és a mikrofonhoz képest elfoglalt helyzet függvényében.

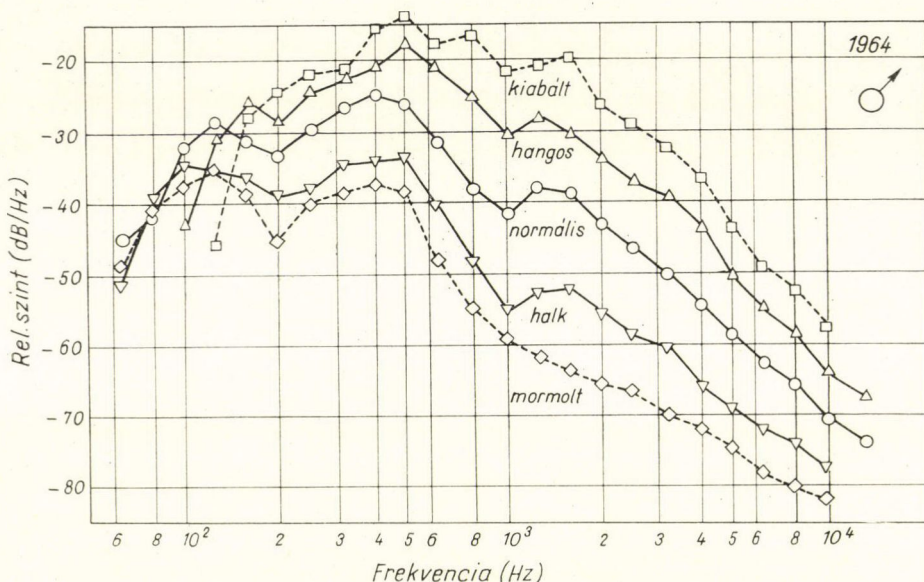
Hangerő	Szemben			Oldalt 1964 magyar	Háttal 1964 magyar
	1961 magyar	1962 német	1964 magyar		
Mormolt	—	—	63	—	—
Halk	66	69	67	62	57
Normális	74	77	74	70	64
Hangos	82	84	81	76	72
Kiabált	—	—	86	—	—



6. ábra. Tizennégy nő német nyelvű halk, normális és hangos beszédkórusáról készült színeképek. Hét-mikrofonos felvétel stúdióban.

A 7. ábrán bemutatott eredmény sorozat az eddig mondottakat megerősíti, de ki is egészíti. Kiténik belőle, hogy mind a kiabált, mind a mormolt beszéd színeképe elveszíti eredeti jellegét. Ezt füllel is nagyon jól halljuk: a hangos beszéd hangszín tekintetében nem kiabálás jellegű, bár teljes szintben csak 5 dB különbség van közöttük. A színeképek jól szemléltetik ezt a különbséget. A kiabált alaphang egy

oktávval föltolódik, az első maximum teljesen eltűnik, a második pedig szélesebbé válik. A mormolt beszéd színeképében viszont a második minimum és a harmadik maximum teljes elmaradása feltűnő, és nyilván ez okozza a különleges, jellegtelen, álmosító hatását. A második maximum ez a szilárd pont, amit minden színekép egyaránt tartalmaz.

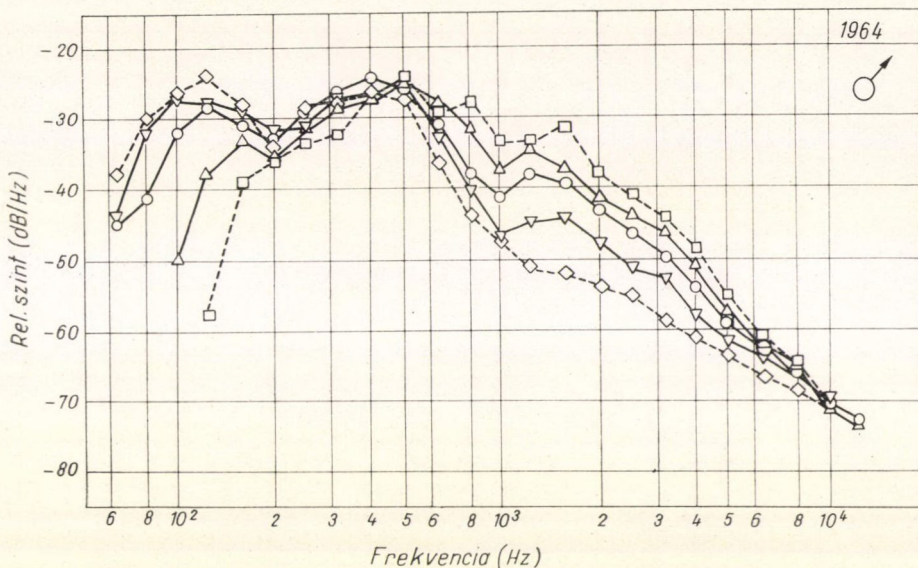


7. ábra. Nyolc személyes férfi beszédkorús különféle erősségű beszédének színeképei. Egy-mikrofonos felvétel süket szobában. 0 dB a normális hangerősségű beszéd teljes szintje.

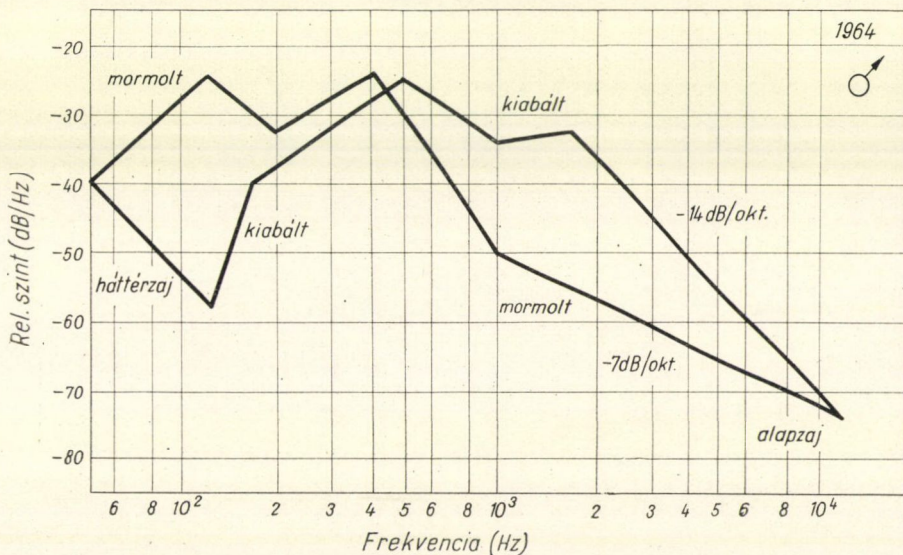
A teljes szintek dinamika-átfogása az I. táblázat szerint 23 dB. Ha a színekép maximuma elég kiemelkedő, és tőle jobbra az esés -3 dB/oktávnál jóval meredekebb, a teljes energiát első közelítésben ez a maximum határozza meg. Tekintve, hogy a 7. ábra színeképei a maximumok nagyjából azonos helyre esnek, a teljes szintű dinamika-átfogás értéke ott olvasható le: esetünkben 400 Hz-en 22 dB, 500 Hz-en pedig 25 dB. Amíg a színeképesés előbbi feltétele teljesül, a magasabb összetevők szélesebb átfogása a teljes szinteket nem befolyásolja. Mindenesetre megjegyzésre méltó, hogy 800...2500 Hz közötti tartományban az összetevők 38...45 dB szélességet fognak át, 1500 Hz körül mutatkozó maximummal. Ez a tény arra is rávilágít, hogy a hangszínezetben észlelt változások okai között ennek a színeképi tartománynak az alakulása jelentős szerepet tölt be.

A színeképek alakjának összehasonlítására alkalmasabb a 8. ábrán látható ábrázolási mód. Az ábra úgy készült, hogy minden színeképet a normális hangerősségű beszéd teljes szintjére redukáltuk. Mintha hangerőszabályozóval a görbéket önmagukkal párhuzamosan azonos hangerőre állítottuk volna be. Ez az ábrázolásmód nemcsak azért tanulságos, mert általa a színeképek egymástól való eltérése közvetlenül tanulmányozható, hanem azért is, mert a színeképek emelkedési és esési adatai is összehasonlíthatók. A hangerő növekedésével a színekép kezdő és befejező szakasza

is meredekebben változik. A 9. ábrán bemutatott összefoglaló határgörbe talán világosabban szemlélteti a mondottakat. A két szélső határesetben -14 dB/oktáv (kiabálás), ill. -7 dB/oktáv (mormolás) a szinképesés jellemző adata.



8. ábra. Nyolc személyes férfi beszédkorús különböző erősségű beszédének szinképei. Mint a 7. ábra, de 0 dB a mindenkor hangereőség teljes szintje.



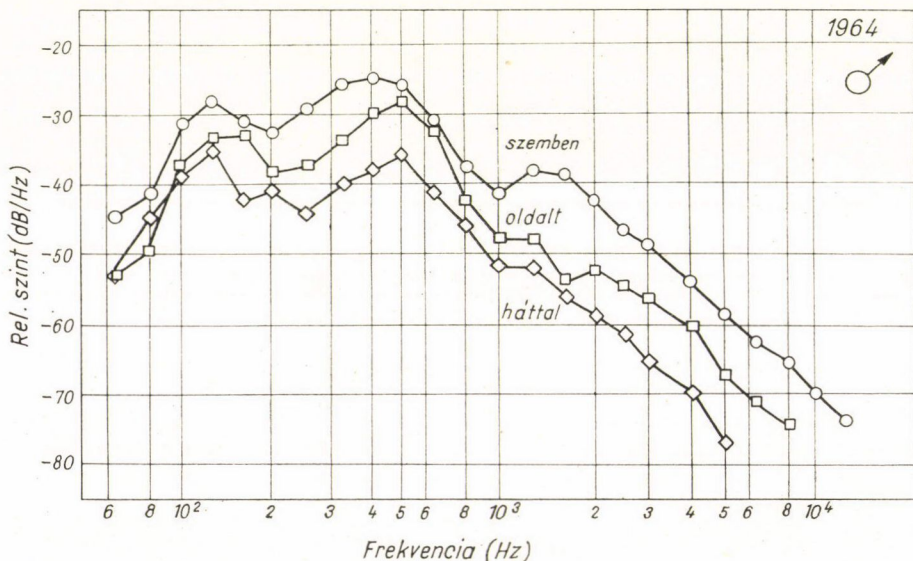
9. ábra. A 8. ábra adatainak körvonalrajza.

A hangerővel érzékenyen változó színeképalak magyarázatot ad a kísérleti szórás egyik okára. Az egyes személyek azonos hangerőre való beszabályozásakor úgy jártunk el, hogy inkább a mikrofontól való távolságot változtattuk, mintsem hogy az illetőt megszokott beszéd-hangerejének megváltoztatására bírtuk volna. Ez pszichológiailag helyes, de a színeképi szórás szempontjából nem. Ezért kell kiemelni a beszédkórusból a különlegesen erős vagy különlegesen gyöngye hangú egyéneket. Az I. táblázat adatainak a színeképekkel való összevetése azt mutatja, hogy már 2...3 dB hangerő-különbség is lényeges színeképi változást okozhat. Egyben azt is láthatjuk, hogy a német „hangos” beszéd hangereje középhelyet foglal el a magyar „hangos” és „kiabált” hangerő között. Lehet, hogy ez az oka a német „hangos” színekép rendellenes viselkedésének.

3.4 A beszéd irányítottságára jellemző, szemben és hátulról mérhető energia-szintek különbsége 10 dB; a színeképi összetevők közti különbség 125 Hz alatt 5...6 dB 125...1250 Hz között 10...12 dB, 1250 Hz fölött 16...18 dB.

Általános akusztikai ismereteink alapján azt várhatnánk, hogy a mélyhangú összetevők alig irányítottak és az irányítottság a magas hangok felé arányosan növekszik. Azonban a 10. ábra adatai ezt csak részben erősítik meg. A hátrasugárzásnak az egyenletes eséshez képest mutatott ingadozása a ± 5 dB-t is eléri. A kórus-felvételek kísérleti körülményei ezúttal is azonosak a 7. ábra kapcsán ismertetett körülményekkel. A 8-tagú férfikórus a mikrofonnal szemben, hozzá képest 90° -kal és 180° -kal elfordulva beszélt.

Ezúttal a süket szoba akusztikai adatai is befolyásolhatták a kísérletek végeredményét. A felvételre szolgáló kisméretű tér üres állapotában az energia négyzetesen



10. ábra. Nyolc személyes férfi beszédkórus különféle irányból felvett normális erősségű beszédének színeképei. Az adatok azonosak a 7. ábráéval.

csökkenő törvénye 160...10 000 Hz között $\pm 1,5$ dB pontossággal teljesül. Az emberek jelenléte ezt az adatot természetesen lerontja. Hibát okozható zavarok elsősorban az oldal-irányban beszélés esetén jelentkeznek. Ilyenkor ugyanis az emberekről visszaverődő és rajtuk elhajlást szenvedő energiahányad kiszámíthatatlan interferenciákat okoz. Ezért az oldalt mondott szöveg elemzéséből kapott színekpről nem kívánunk lényeges következtetéseket levonni. Annyi mindenesetre a 10. ábrából is látszik, hogy az oldalállású színekpr mindenütt a szemközti és háttal álló színek közé esik és azok alakját megközelítően követi. Ennek a követésnek különlegessége, hogy az oldalirányú színekpr összetevői 500 Hz környékén a szembenállóhoz, 1000 Hz környékén viszont a háttal állóhoz esnek közel.

Hátrasugárzás mérésekor elsősorban a süket szoba határfelületeiről érkező mély hangú visszaverődések okozhattak hibát, ami azonban az előzőnél kisebb mértékű. A hátrasugárzási színekprnek a szembenállóhoz képest a relatív eltérése középtértékben $-6...-8$ dB/dekád. Ez a görbe csak 5000 Hz alatt volt mérhető.

Bár ez a kísérlet sok hibaforrással rendelkezett, mégis fontosnak tartottuk megemlítését, mert alkalmat teremt a hangerősség és irány szerinti színekprváltozás összehasonlítására. Mivel az egyik változás jellegzetessége a színekpr „átbillenése”, a másiké a színekpr „szétnyílása”, a kétféle hangszínváltozás egymást nem kompenzálhatja. Pl. halkított hanggal nem utánozható a hátrafordulás hangszíne, stb. Hátrasugárzáskor ugyanis semmi magas hangot nem kapunk, míg halk beszéd esetén ezek a komponensek nemcsak megvannak, hanem jól mérhetőek is. Ami a hátrasugárzási színekpr magas esési jellegét illeti, az inkább a hangos, mint a halk hangokéhoz hasonló, miután értéke a 10. ábrán kb. $-12...-14$ dB/oktáv.

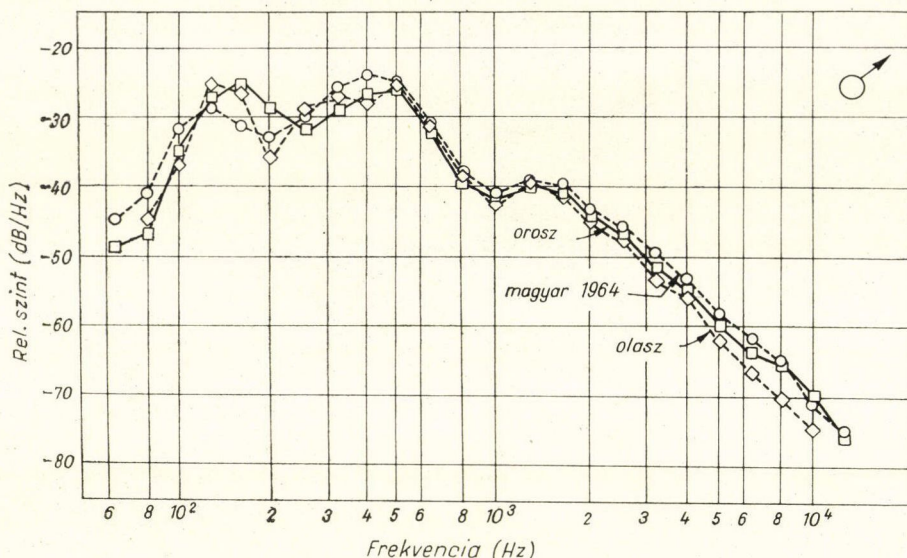
3.5 Normális hangerősségű hat európai nyelvre meghatározott beszéd energia-színekpei hasonló alakúak, és általában ± 3 dB szóráshatáron belül megegyezők. Ennél nagyobb eltérés a színekpek között csak az alaphang által befolyásolt frekvenciatartományban (férfiaknál 63...250 Hz nőknél 100...400 Hz) továbbá a második formánshely környékén (férfiaknál 800...2000 Hz, nőknél 1000...2500 Hz) található.

A férfi beszédre vonatkozó eredményeket a 11. és 12. ábrán, a női beszédre vonatkozókat a 13. és 14. ábrán foglaltuk össze. A magyar férfi beszéd színekpét az 1964. évi mérések középértéke képviseli. Eltérése az 1956. ill. 1961. éveiktől a 2. ábrán tanulmányozható. Ide azért kíváncsított az egy-mikrofonos mérés adata, mert a legtöbb nyelvre ilyen típusú mérést végeztünk. A magyar női beszédre a legmegbízhatóbb az 1961. évi színekpr: ezt közöltük a 13. ábrán.

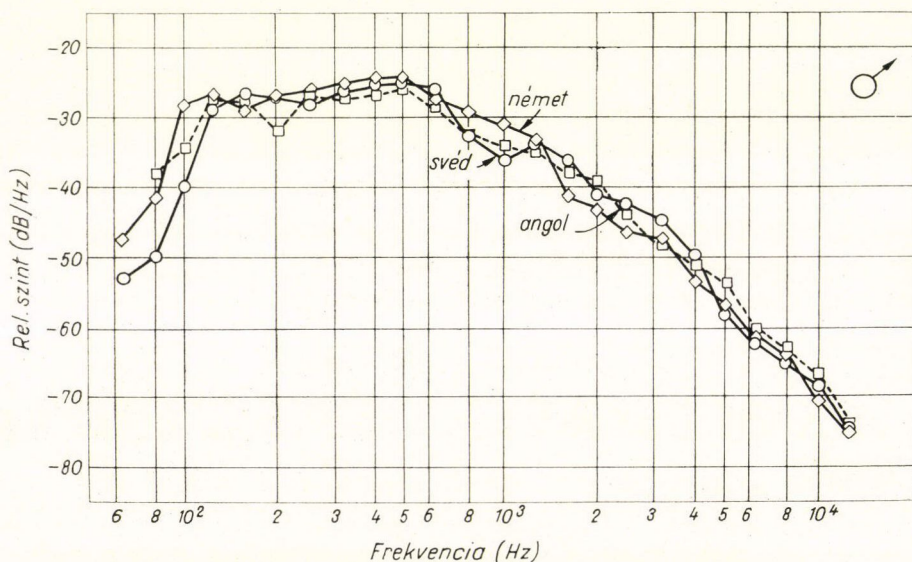
A német felvételekről a 3.3 pontban már említést tettünk. Ide az 5. és 6. ábra normális görbéit vettük összehasonlításul. A következő méréseket svéd nyelvre a stockholmi Speech Transmission Laboratory-ban végeztük 1964 őszén [9]. Ez egy-mikrofonos süket szobai mérés 10—10 személlyel. Az amerikai—angolra vonatkozó mérések New Yorkban folytak a Columbia Egyetemen 1965 tavaszán, nagyjából az előzővel azonos mérési körülmények között. Az olasz méréseknél Torinóban az Istituto Galileo Ferrarisban csak 8—8 főt sikerült összehozni; az egy-mikrofonos mérést erősen csillapított kis stúdióban hajtottuk végre. Az orosz nyelvre végzett kísérletekhez a budapesti Szovjet középiskola tanárait kértük föl: 6 férfi és 8 nő kórusát tudtuk a Magyar Rádió egyik kisebb stúdiójában 3, ill. 4 db 8-as irány-jelleggörbéjű mikrofonnal felvenni.

Irodalmi összehasonlítható adat saját méréseinken kívül kevés áll rendelkezésre.

Egyes személyek beszéde alapján nyert hosszú idejű átlagos szinképek angol, orosz, svéd és lengyel nyelvre kerültek közlésre. Az irodalmi hivatkozásokat egy korábbi dolgozatban [1] gyűjtöttem össze, s ugyanott a régi mérési eljárás kritikai vizsgálatá-

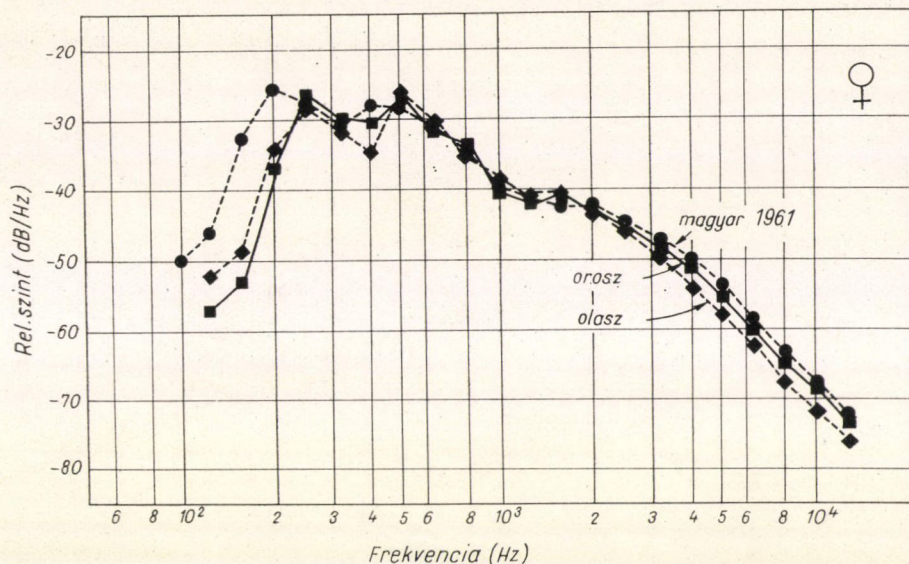


11. ábra. Magyar, olasz és orosz nyelvű férfi beszédkorpusok szinképei.
Az adatokat lásd a szövegben.

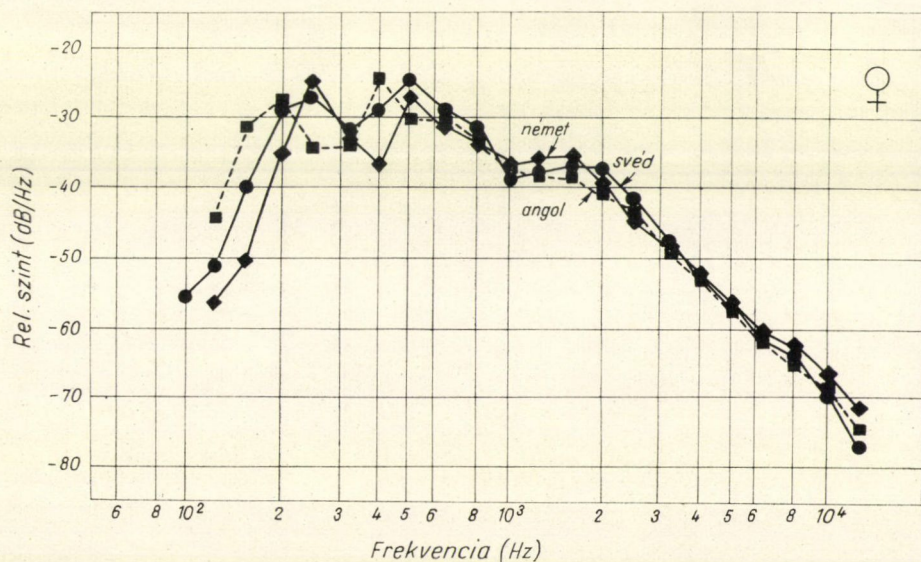


12. ábra. Angol, német és svéd nyelvű férfi beszédkorpusok szinképei.
Az adatokat lásd a szövegben.

val is foglalkoztam. Tudomásom szerint I. Barducci és munkatársai [14, 15] voltak az elsők, akik az új módszerrel 1960-ban az olasz nyelv átlagos energia-színképét meghatározták. Sajnos, a null-szintet a színkép maximuma helyén rögzítették és a

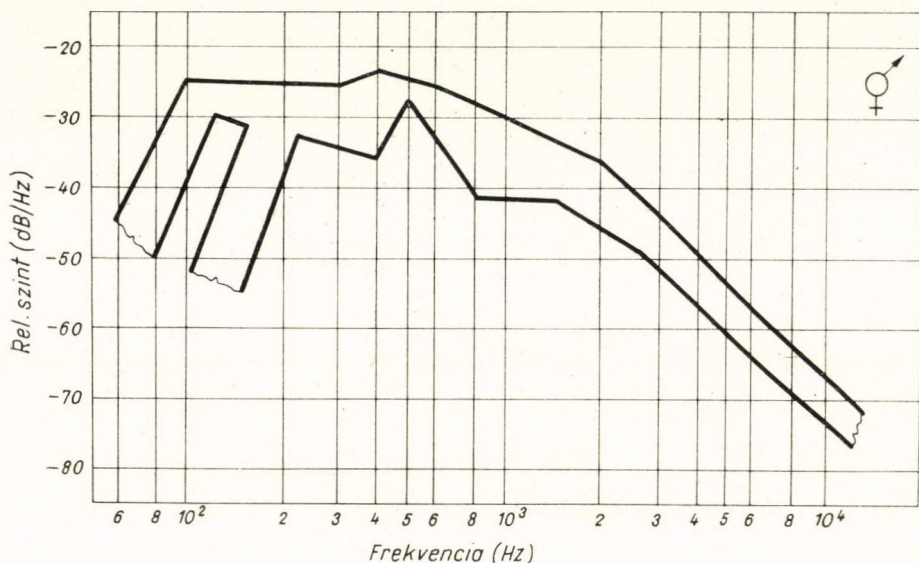


13. ábra. Magyar, olasz és orosz nyelvű női beszédkorús színképei.
Az adatokat lásd a szövegben.



14. ábra. Angol, német és svéd női beszédkorús színképei. Az adatokat lásd a szövegben.

teljes szinképtértékeket nem közölték. Az összehasonlítás így csak kb. 3 dB hiba-lehetőséggel végezhető el. Azonfölül Barducci, aki méréseit telefontechnikai célból készítette, csak 100...5000 Hz között számította ki a szinképeket. Így végül is az összehasonlításra kevés lehetőség nyílik. Annyi mindenestre rögzíthető, hogy mind a férfi, mind a női hangra Barducci az 1600...3200 Hz közötti oktávban nálunk átlag 4 dB/Hz-cel alacsonyabb szinteket mért. Máshol nincs lényeges eltérés a kétféle mérésorozat között, ill. az eltérések magyarázhatók (alaphang; hangerősség, stb.).



15. ábra. A dolgozatban közölt összes normális hangerősségű beszédsszinkép közös körvonalrajza.

Visszatérve a hat európai nyelvre általunk meghatározott szinképekre, a négy ábrán közölt hármas csoportokban sehol nem észlelünk a mérési módszer saját szórási határain kívül eső értékeket. Az első maximum és minimum helyében és értékében mutatkozó ingadozások okairól már a 3.1 pontban részletesen beszéltünk. Példaként vegyük az angol és a német nyelvre kapott női szinképet. Az amerikai nők kórusának összeállítása úgy sikerült, hogy az átlagos alaphang 200 Hz volt. Utána a minimum élesen jelentkezik (éppen a két mért terc érték közé esne), majd pontosan az alaphangtól oktávnyira megjelenik a második maximum. A német elsőéves orvostanhallgatónők csoportja 250 Hz körüli alaphanggal bírt. Ennek a második tercben mért éles minimuma után 500 Hz-en mutatkozik az ugyancsak éles második maximum.

Egyébként az alaphang magassága, és természetesen a szinkép alakulása sem korfüggő. Ezt magam is tapasztaltam, *de I. Barducci és F. Bianchi* [15] részletes mérésekkel — tíz éves korcsoportokkal 60 éves korig — igazolta is.

Az általam mért összes normális hangerejű szinkép összemásolva a 15. ábrán látható szinképcsatornát tölti be. Legfeltűnőbb benne a 2000 Hz fölötti szakasz, amelynek ± 3 dB-es szélességében az értekezésben közölt hat nyelv 87 férfi és 95 nő

kórustagjának (ebből 39 férfi és 31 nő magyar) beszédszíneképe bennfoglaltatik. Az 1000 Hz környékén mutatkozó kiszélesedéshez a következő pontban fűzünk megjegyzést, az 500 Hz alatti szakasz viselkedését már kimerítően megtárgyaltuk. A 15. ábra beszédátvitel-technikai szempontból hasznos normának tekinthető.

3.6 A vizsgált nyelvek közötti jellegzetes színeképi eltérés lehetséges helye a 800...2500 Hz közötti terület. A színekép itt mutatott jellege szerint legalábbis egyes nyelvcsoportok egymástól elválaszthatók.

Utolsó megállapításunk megvilágítására tekintsük még egyszer a 11—14. ábrákat. A nyelvek szerinti csoportosítás készakarva úgy készült, hogy az egyes ábrákon a színeképek 500 Hz fölötti szakasza ± 2 dB szóráshatáron belül azonos legyen. Ámde, ha a csoportokat egymással hasonlítjuk össze, mind a férfiaknál, mind a nőknél jellegzetes eltérést találunk a színekép-csoportok között. A magyar—olasz—oroszos csoport 1000...2000 Hz között (pontosabban férfiaknál 800...2000 Hz között, nőknél 1000...2500 Hz között) 4...8 dB-lel kisebb szintet ér el, mint az angol—német—svéd csoport.

II. TÁBLÁZAT

Magánhangzó/mássalhangzó arány a vizsgált nyelvekre

Nyelv	Arány
Olasz	48 : 52
Magyar	41,5 : 58,5
Orosz	40 : 60
Svéd	38,5 : 61,5
Angol	37,5 : 62,5
Német	36 : 64

A megadott frekvenciatartomány már többször úgy szerepelt megállapításainkban, mint a hangszín változásaira legérzékenyebb színeképi terület. Talán a nyelvcsoportok jellegzetes hangszínének indikálására is alkalmasnak látszik. Ugyanis az azonos csoportba foglalt nyelvek színeképei ± 2 dB szórással együtt futnak, a csoportok közötti közepes eltérés pedig egy oktávon belül 4...8 dB. Egyébként az 500...5000 Hz közötti tartomány a színekép legkevesebb nehézséggel elemezhető része, tehát az adatok ellenőrzése szempontjából a legmegfelelőbb görbeszakasz.

Az eltérések magyarázatában arra hivatkozhatunk, hogy az alacsonyabb színképszintű három nyelv valóban a hatos vizsgált csoport három „lágyabb” tagja. Erre a fogalomra a magánhangzó/mássalhangzó arányt szokás közelítő mértékül használni. Ez az arány a vizsgált nyelvekre a II. táblázat szerint alakul. Nyilván érdekes volna ebből a szempontból szélsőségesebb arányokkal rendelkező nyelvek energia-színeképét is megvizsgálni. Egy alkalommal (1965) már tettünk kísérletet mongol diákok beszédkórusának rögzítésével, azonban a felvétel technikai hiba miatt nem sikerült. Elképzeltető, hogy az európaiaktól eltérő struktúrájú nyelvek színeképe az eddigi eredményektől nagyobb eltérést fog mutatni.

4. További mérési lehetőségek és alkalmazások

A beszédkórus-módszer módosított változatai további mérési lehetőségeket jelentenek kvázisztochasztikus folyamatok sztochasztikussá való átalakítására és ezáltal a hosszúidejű folyamatos színekép egyszerű meghatározására. Ezek közül hármat magam is kipróbáltam. A három kiterjesztési terület: a) egyes beszédhangok színeképének meghatározása, b) az egyéni beszédhangszín mérése és c) átlagolt zenei színeképek előállítása.

4.1 A zöngétlen réshangok (f, s, ʃ) színeképi elemzésére azelőtt is használták a szűrőkörös módszert. A mérés fő nehézségét a hangzó rövidege mellett a színekép időbeli ingadozása okozza. Az ingadozás hosszabb idő átlagában közepelhető, de keskenysávú mozgó-szűrős elemzés esetén a hangképzés diszkrét elemi folyamatainak egy-egy pillanatnyi állapota rögzítődik. És ez nagyon eltérhet a statisztikus középértéktől, ahogy pl. egyetlen elektron időbeli sorsa eltér a sörét-zaj statisztikus jellegetől. Az ilyen típusú elemzés ezért a színeképet nagyon „vonalas” jellegűnek, átmenetinek és megismételhetetlennek mutatja.

A zöngétlen réshangok jellegének megfelelő időbeli folyamatok összegezésével elérhető sztochaszticitás magából a központi határérték tételből következik. Ezért nem is kell az általánosabb beszédkórus-tételre hivatkoznunk a kísérleti összeállítás indokolásához. Ha 10 ember egyszerre ejti ki a „lassen” szót, az „s” hang pillanatnyi ingadozásai is és az esetleges egyéni ejtésbeli eltérések is elmosódnak. Ha ráadásul a 10 ember nem azonos szavakat mond, hanem vegyesen olyanokat, amelyekben az „s” hang azonos időben hangzik (pl. lassen, Hessen, Klassik, wissen, stb.) a kapcsolódó hangok fonetikai hatását is csökkentjük. Így valóban az absztrakt „s” hangot nyerjük, amelynek színeképe terc-szűrős elemzéssel megkapható.

Ezzel a módszerrel az európai nyelvek zöngés és zöngétlen réshangjainak színeképét meghatároztam [16, 17]. Az eredmények közül az „f” hang színeképét emelem ki. A színeképvonal-szint értéke 200...16 00 Hz között $\pm 1,5$ dB pontossággal állandó. Ez azt jelenti, hogy ily módon végtelenített szalaggal a legegyszerűbben és legolcsóbban lehet fehér-zaj generátort készíteni.

Ugyanezzel a módszerrel más beszédhangok szűrőkörös elemzését is megkísérreltem. A nazálisok és l-r-félék esetében több, a magánhangzók esetében kevesebb sikerrel határoztam meg a színeképeket. Úgy látszik, hogy ezekben az esetekben a klasszikus Fourier-féle elemzés jobb eredményű.

4.2 Az egyéni beszéd hangszínének meghatározására a módszert a következőképpen terjesztettem ki. Egyetlen személy hosszú idejű beszédét szalagra vesszük, majd a szalagot megfelelő számú darabra vágjuk és egyetlen közös szalagra másoljuk. Az eredmény ugyanolyan, mint a beszédkórus zöreje. Lényeges, hogy lehetőleg csak egyetlen összeszámolást végezzünk, hogy a jel/zaj viszony jó maradjon. Mivel így a munkához legalább $8+1$ azonos tulajdonságú szalagjátszó szükséges, a technikai apparátus nagyon igényes.

Eddigi próbálkozásaimban két átjátszással: 3 szalagról 1 közös szalagra, majd ennek szétvágásával az átjátszást megismételve, összesen 4 szalagjátszóval is elég jó eredményt értem el. Három férfi és három nő egyéni beszéd-hangszínét hasonlítottuk így össze a magyar nyelvre 31 férfi, ill. 31 nő hangja alapján megállapított középértékkel. A színeképek összehasonlítása néhány érdekes következtetésre ugyan alkalmat adott, de fontosabb gyakorlati következményekre nem jutottam. Az eredmények inkább fiziológiai és nyelvészeti szempontból hasznosíthatók és ilyen értelemben ke-

rültek közlésre [18]. W Jassem egy újabb közleményében [19] az eredményeket gyakorlati szempontból is érdekesnek tartja, ha a vizsgálatokat több beszélőre is kiterjesztik. Ilyen vizsgálatról számolt be C. Bordone—Sacerdote és G. G. Sacerdote Tokióban (1968) a 6. Nemzetközi Akusztikai Kongresszuson [20].

4.3 A beszéd akusztikai jelfüggvényeivel végzett keverési lehetőségek feltételezhetőleg zenei jelfüggvényekre is alkalmazhatók. A cél ezúttal is az, hogy egyrészt folytonos színeképet állítsunk elő, másrészt időbeli kvázisztochasztikus folyamatokból állandósult állapotú tisztán sztochasztikus folyamatokat szerkesztünk.

A sok személy által egyszerre mondott szavakhoz hasonló módszerrel pl. egy hangszer több hangját egyszerre szólaltathatjuk meg. Ha az egyes hangoknak egyébként vonalas színeképe van, az egyidejű megszólaltatáskor a vonalak annyira sűrűsödnek, hogy a színekép folytonosként — párhuzamos terc-szűrős elemzéssel — vizsgálható. Például orgona egy teljes oktávjának egyidejű megszólaltatásakor az első három terc-sávba is sávonként 4 színeképvonal jut. A helyzet még kedvezőbb, mint a beszédkórus legalsó sávjaiban, ahol az átlagos alaphang fölötti tercsávokba esetleg egyáltalán nem kerül színeképvonal.

Ezzel a módszerrel kevés hangszer vizsgálható, mert követelményünk, hogy egymás melletti hangokat egyenlő feltételek mellett egyszerre kell megszólaltatni. Az orgona kivételesen alkalmasnak látszik a vizsgálatokra. Még a kutatómunka megkezdésekor ilyen kísérleteket is végeztünk Budapesten a Pesti Ferences templom orgonáján [21]. Az eredmények azt mutatják, hogy a módszer különösen a nagyobb frekvenciák felé a színeképesítés jellegének és esési értékének meghatározásában kedvező. A templomban uralkodó aránylag magas zajszint az orgona hangerejével bőven ellensúlyozható, úgy hogy 50...8000 Hz között jól kiértékelhető színeképekhez jutottunk.

A másik módszer az egyéni beszédhangszín meghatározásához alkalmazott eljáráshoz hasonlít. Ezzel szólóhangszeren vagy zenekarral játszott hosszabb darabrészekből készíthetünk statisztikus zörejt jellegű összemácsolásokat. Próbaképpen néhány, különféle hangszer-összetételű zenedarab színeképét meghatároztam és az eredményekről röviden be is számoltam [22].

Ezúttal azonban a beszédkórus-tétel nem igazolható és az eredmények sem teljesen meggyőzőek. Ennek oka a következő. A beszéd hangkészlete mintegy 40-féle jól definiált jellegű hangzóból áll. Ezek előfordulási valószínűségére egy-egy nyelven belül szigorú statisztikai törvények érvényesek. Hangfekvésben csak két-féle változatunk van: a férfi és a női hang. Ezzel szemben a zene hangkészlete — figyelembe véve a hangszer-kombinációkat is — jóformán korlátlan hangszín-lehetőséget tartalmaz. Ezzel minden szerző minden darabjában másképpen gazdálkodik. Tehát nincs két, azonos hangstatisztikával rendelkező darab. Végül az egyes hangszerek hangfekvése igen nagy frekvenciatartományt fog át, és a hangszerek vagy hangszercsoportok szerepeltetésének gyakoriságára sincs semmiféle szabály.

Meg gondolásaink, valamint mérési tapasztalataim alapján legfőljebb annyi várható, hogy igen jól meghatározott körülmények között (pl. vonószekerek színeképe, egy gyors és egy lassú tétel teljes felosztásának 10—10 részből való összemácsolásával) a keveréstől függetlenül megismételhető eredményeket kapunk.

4.4 Beszédatviteli rendszerek (telefonvonal, többcsatornás vívőfrekvenciás berendezések stb.) mérésében és tervezésében nagy szerepet játszik a vonalakon való érthetőség vizsgálata. Az érthetőség elsősorban a jelszint, a frekvenciajelleggörbe és a vonalban keletkezett zajok függvénye. A vonalzajok nagy része áthallás követke-

ménye, tehát mind a három tényezőhöz a hasznos jel — jelen esetben a beszéd — teljes szintjének és színeképének ismerete szolgáltatja a legfontosabb adatokat.

Az áthallásból eredő zajterhelés vizsgálatára üzemi körülmények között hangutánzó zajgenerátorból származó jelet adnak egy vagy több csatornára és ennek hatását a kiválasztott csatornában mérik. Az átviteli berendezés gazdaságos tervezésében az üzemi viszonyok közt kielégítő érthetőség elérése a cél. Túl jó vonalak készítése aránytalanul drága. Ezért fontos, hogy az áthallási vizsgálatok zajgenerátora pontosan a beszédszíneképet szolgáltatassa. Mivel ezt eddig nem ismerték kielégítő pontossággal, inkább szigorúbb vizsgálati körülményeket írtak elő.

Két helyen egyidőben ismerték föl, hogy a beszédkórus szolgáltatja színeképek adják a célra a legmegfelelőbb mérési eljárást: *I. Barducci* és *F. Bianchi* az olasz „U. Bordoni” alapítványnál [15] és *Lajtha György* a Magyar Postánál [23]. *Lajtha* a magyar színeképnek megfelelő generátorral dolgozott, míg *Barducci* és munkatársa magát az olasz beszédkórus szalagját használta generátornak. Az utóbbi radikálisabb eljárás és véleményünk szerint is helyesebb. Megfontolandó azonban, hogy nemzetközi szabványosítás esetén szabad-e a nemzeti nyelv színeképéhez ragaszkodni. A kérdéses időben még nem készültek el a hangerő okozta színeképváltozásra valamint a különféle európai nyelvek színeképére vonatkozó vizsgálataim. Ezek az eredmények több részletében befolyásolhatják még a végleges mérési eljárás kidolgozását.

Mindkét közlemény szerzője kiemeli a beszédkórus eljárás általunk is részletezett előnyeit, valamint a beszédzörejnek műbeszéd (artificial voice) céljára való különleges felhasználhatóságát. *Lajtha* azt emeli ki, hogy a kórusfelvétel módja megfelel a vivőfrekvenciás berendezéseknél meglevő üzemi viszonyok körülményeinek, valamint hogy a stabilis értékek leolvasásához nincs szükség nagy időállandójú műszerekre. *Barducci* és *Bianchi* e mellett a beszédzörejt tartalmazó szalagot az összes mesterséges vizsgálati beszédhangforrás közül kimondottan a legjobbnak tartja.

Mint a 4.1 pontban említettük, hogy a beszédkórus módszer fehér-zaj generátor egyszerű szerkesztését is lehetővé teszi. Ha csak hangfrekvenciás tartományban van szükségünk fehér-zajra, az „f” hang kórusfelvételének egyenletes színeképű zörejangja kitűnően megfelel a célnak. Ezzel sok elektroakusztikai és teremakusztikai mérés műszerigénye egyszerűsödik. Ezúttal a beszédzörej felvételt, mint a telefontechnikában fontos zajgenerátort ismertük meg. Mindkét „beszédkórus generátor” előreláthatólag még sokféle mérési célra lesz használható. *Békésy* egyik újabb cikkében [24] azt állítja, hogy ha „cocktail-party” zajban valaki nem érti egy kiválasztott beszélő szövegét, az biztos idegdefektusra utaló jel. A beszédzörej pontosan a „cocktail-party” zajának felel meg, tehát elfedő hatásának vizsgálata még fontos diagnosztikai módszerré fejlődhet.

4.5 Régóta ismert, hogy a frekvenciafüggetlen, vagyis az egész átviteli sávban egyenletes hangerőszabályozás fiziológiailag helytelen. A hangerő ilyen fajta csökkentése az egyenlő hangosságú gőrbéinek alakja miatt viszonylag erősen vágja a kis frekvenciájú színeképi összetevőket, így az eredeti hangszínt eltorzítja. Valamivel kisebb mértékben az egész magas hangok tartományában is hasonló a helyzet. Ezért már régebben bevezették a „fiziológiai” hangerőszabályozást, amelynél a hangerő csökkentésekor a színekép két végét megfelelő szűrőkörökkel kiemelik, erősítésekkel pedig némileg vágják. Ez a fajta javítás azonban kevés gyakorlati eredménnyel járt.

Ugyancsak ismeretes volt vizsgálataink előtt, hogy a beszéd széles frekvenciasávokba eső energiahányada a hangerő változásával nagyjából hogyan változik.

Ilyen közelítő ábrát találunk pl. *V. K. Jofe* és *A. A. Janpolszkij* [25] 1954-ben megjelent akusztikai grafikon gyűjteményében. Ezek az információk azonban annyira általánosak, hogy az irodalomban a hangerőtől függő szintképváltozás első megbízható adatának saját közleményeinket tekintik [26, 27].

A 3.3. pont tárgyalásában megmutattuk, hogy a hangerőtől függő szintképváltozás lényeges eleme a színekép 500 Hz körüli „átbillenése”. Ez a tény szükségessé teszi a helyes hangerőszabályozásról vallott elképzeléseink megváltoztatását. Ha ugyanis a normális hangerejű beszédet halkabbra akarjuk szabályozni, a mélyhangú összetevők megemelése mellett az 1000...2000 Hz környéki összetevőket az átlagos szintcsökkentéshez képest is süllyeszteni kell. Ez a fajta hangerőszabályozás természetesen csak a beszédre vonatkozik. Zenére a színeképtorzulás hasonló alakulása sejthető, de még nem igazolt.

A stúdiók fő szabályozási problémája nem annyira a hangerő csökkentése, mint inkább a növelése. *W. Kuhl* 1965-ben német nyelvű beszédkórus vizsgálataim eredményei alapján mutatott rá erre a problémára [26]. *Kuhl* azt számította ki, hogy a férfi hangon halkan mondott szöveg hangosra való fölerősítésekor a hallásküszöb tájára eső legmélyebb komponensek hangosságai szintemelkedése abnormálisan nagy lesz. Német kórus vizsgálataim színeképéből számolva a halktól a hangosig ezt az értéket 36 phonnak találta. Ez okozza a férfi hang fölerősítésekor jelentkező dörgő mélyhangú zörejt. Hasonló hatás női hangnál azért nincs, mert az alaphang egy oktávval magasabban fekszik, ahol a hallásküszöb görbe már jóval alacsonyabb szinten fut. A Kuhl-féle megállapítás igen fontos gyakorlati következménye: férfi színészeknek nem szabad halkan beszélni a rádióban.

A dolgozat megírása óta további méréseket végeztek külföldi szerzők a beszédkórus módszerrel. Így *Zalewski* és *Majewski* [28] a lengyel nyelvre, *Bañuls-Terol* [29] pedig a spanyolra határozta meg a beszéd átlagos energiaszínképét az általam kidolgozott eljárással. Ezek a színeképek is beférnek a 15. ábra körvonalai közé. Ugyanakkor az utóbbi közleményből értesültem arról, hogy *Sherman* [30] 1 férfi és 1 nő beszéde alapján *Dunn* és *White* módszerével a kínai „mandarin” nyelvre nyert színeképe nagyban eltér az európai nyelvek színeképeitől. A keleti nyelvek másfajta hangzását látszik megerősíteni az a kísérleti eredmény is, amit saját magunk értünk el mongol diákok beszédkórus felvétele alapján. Ezek az előzetes eredmények azonban még további megerősítésre szorulnak.

Köszönetnyilvánítás

A kísérletek megszervezéséért, a stúdiók és laboratóriumok átengedéséért és a kísérletekben való önzetlen segítségért sok személynek és intézménynek tartozom hálás köszönettel. Közülük szeretném kiemelni *Horvát Gy.* és *Sófalvi K.* (Magyar Rádió) valamint *Takács F.* (Magyar Hang-
lemezgyártó), továbbá *G. Fant* és *J. Mártony* (Speech Transmission Laboratory, Stockholm), *C. M. Harris* (Columbia University, New York) és *G. G. Sacerdote* (Istituto Galileo Ferraris, Torino) segítségét. Főbb munkatársaimnak, *Karsai Elekné*, *Illényi András* és *Radnai Jenő* kartársaknak (Akusztikai Kutatócsoport, Budapest) szintén köszönöm közreműködését. A vizsgálatokat részben a Magyar Tudományos Akadémia, részben a Ford Alapítvány támogatásával végeztem.

IRODALOM

1. *Tarnóczy T.*, A beszédkórus módszer. Magyar Fizikai Folyóirat **20**, 105—127, 1972.
2. *T. Tarnóczy*, Nouvelle méthode pour la détermination de spectre de la parole. Folia Phoniatrica **8**, 65—70 (1956) — Determination of the speech spectrum through measurements of superposed samples. J. Acoust. Soc. Am. **28**, 1270—1275, 1956.

3. A. J. Andrieu, Comparaison des caractéristiques de différents microphones. *Revue du Son* No 170/171, 261—271, 1967.
4. T. Tarnóczy, The speech noise and its spectrum. *Acta Phys. Hung.* 7, 87—106, 1957.
5. S. O. Rice, Filtered thermal noise — fluctuation of energy as a function of interval length. *J. Acoust. Soc. Am.* 14, 216—227, 1943.
6. J. T. Broch—C. G. Wahrman, RMS recording of narrow band noise with the level recorder type 2305. *Brüel and Kjaer Techn. Rev.* No 4/1960 — Effective averaging time of the level recorder type 2035. *Brüel and Kjaer Techn. Rev.* No 1/1961.
7. H. O. Aargard—J. T. Broch, On the averaging time of level recorders. *Brüel and Kjaer Techn. Rev.* No 4/1967.
8. T. Tarnóczy, Neuere Ergebnisse der Sprechchor-Methode. *Ber. II. Akust. Konf., Budapest* 1961. Nr. 35, 1—6, — *Zs. f. Phonetik* 15, 53—64, 1962.
9. T. Tarnóczy—G. Fant, Some remarks on the average speech spectrum. *Speech Transmiss. Lab. QPSR* 4/1964, 13—14.
10. T. Tarnóczy, Bemerkungen über die wichtigen Merkmale des Sprachspektrums. *Wiss. Z. Techn. Univ. Dresden* 13, 1406—1412 (1964).
11. J. Mártony et al. On the analysis and synthesis of vowels and fricatives. *Proc. 4th Intern. Congr. Phonetic Sci. Helsinki* 1961. Mouton, Hague 1962, 208—213.
12. J. Mártony, On the vowel source spectrum. *Speech Transm. Lab. QPSR* 1/1946, 3—4.
13. T. Tarnóczy, Sprachliche Verschiedenheiten, erhalten durch Sprechchormethode. *Proc. 4th ICA-Congr. Copenhagen* 1962. G27 — Kann eine Sprache mit ihrem Sprachspektrum charakterisiert werden? *Zs. Phonetik* 16, 217—222, 1963.
14. I. Barducci et al., Determinazione dello spettro acustico della voce italiana. VII. *Rass. Internat. Elettronica e Nucleare. Roma* 1960. 357—363.
15. I. Barducci—F. Bianchi, Speech spectrum, concerning the average Italian telephone subscriber, at the input of a multi-channel equipment modulator. *Alta Frequenza* 30, 255—259, 1961.
16. T. Tarnóczy, Die Akustische Struktur der stimmlosen Engelaute. *Acta Linguist. Hung.* 4, 313—349, 1954.
17. T. Tarnóczy, Über eine neue Methode zur Bestimmung des durchschnittlichen Spektrums der Sprachlaute und der Sprache. *Zs. f. Phonetik* 12, 301—325, 1959.
18. T. Tarnóczy, Über die objektive Bestimmung des individuellen Sprechspektrums (ungarisch) *Festschrift D. Pais, Budapest* 1956. 117—125 — Sobre la investigación objetiva del espectro individual de la palabra. *Acta ORL Ibero-Americana* 11, 145—152 (1960) — Über das individuelle Sprachspektrum. *Proc. 4th Intern. Congr. Phonetic Sci., Helsinki*, 1961. Mouton, Hague 1962, 259—264.
19. W. Jassem, Vowel formant frequencies as cues to speaker discrimination. *Speech Analysis and Synthesis Vol. I. Warsaw* 1968. 9—41.
20. J. C. Bordone—Sacerdote—G. G. Sacerdote, Statistical properties of individual voices. Report 6th ICA-Congress. Tokyo 1968. B-2-10. — *Acustica*, 21, 199—210, 1969.
21. T. Tarnóczy, Recherches sur le spectre de l'orgue en faisant sonner plusieurs touches à la fois. *Acoustique Musicale CNRS. Paris* 1959, 135—143.
22. T. Tarnóczy, Détermination du spectre de la parole avec une méthode nouvelle. *Acustica* 8, 392—395, 1958.
23. Gy. Lajtha, Geräuschprobleme von Trägerfrequenz-Einrichtungen (ungarisch). *Postakis. Int. Közl.* 2, 1—12, 1961.
24. G. v. Békésy, Some similarities in sensory perception of fish and man. In: *Lateral Line Detectors* (ed. P. Cahn) Ind. Univ. Press, Bloomington/Ind. 1967, 417—435.
25. V. K. Jofe—A. A. Janpolszkij: Rastschetnie grafiki i tablici po elektroakustike. G. E. I. Moskau—Leningrad 1954. S. 160, Abb. 5—11.
26. W. Kuhl, Das Zusammenwirken von direktem Schall, ersten Reflexionen und Nachhall bei der Hörbarkeit von Räumen und bei Schallaufnahmen. *Rundfunktechn. Mitteil.* 9, 170—183, 1965.
27. K. Schmidt—O. Brosze: Fernsprech-Übertragung. Schiele & Schön, Berlin 1967, 112—113.
28. J. Zalewski—W. Majewski: Polish speech spectrum obtained from superposed samples and its comparison with spectra of other languages. *Proc. 7th ICA-Congress, Budapest* 1971 Vol 3., 249—252.
29. V. Bañuls—Terol: Weighted average spectrum of human speech: an approach. *Proc. 7th ICA-Congress, Budapest* 1971 Vol. 3., 253—256.
30. D. N. Sherman, USCE Report 299. July 1968.

A KÉMIAI ELEMÉK EGY PARAMÉTERREL JELLEMEZHETŐ EGYKRISTÁLYAINAK ELEKTRONDIFFRAKCIÓS VIZSGÁLATA. GYAKORLATI MÓDSZER A PONTDIAGRAMOK ÉRTELMEZÉSÉRE*

JIRŮ KOMRSKA—DALIBOR PEŇÁZ
INSTITUTE FOR SCIENTIFIC INSTRUMENTS
CZECHOSLOVAK ACADEMY OF SCIENCES, BRNO

Az elektronsugárnak az egykristállyal való kölcsönhatása eredményeként pontdiagram keletkezik, kétdimenziós rács elrendezésben. Ezt a rácsot egyértelműen lehet jellemezni egy háromszöggel, melynek csúcspontjait az eredeti folt és az ahhoz legközelebb eső két diffrakciós folt képezi. Ez a cikk a lapcentrált köbös (f. c. c.), tér-centrált köbös (b. c. c.), gyémánt és hexagonális (h. c. p.) rendszerben kristályosodó kémiai elemek egykristály pontdiagramjainak gyors értelmezésére ad táblázatokat. A táblázatokat a diffrakciós képet meghatározó háromszög oldalhossz-arányai szerint rendeztük. Bármilyen aránynál a táblázat megadja a beeső elektronnalábbal párhuzamos $\langle uvw \rangle$ irányt, a diffrakciós folt indexeit és a kétdimenziós rács bázisvektorainak szögét. Az elektrondiffrakciós kép értelmezése így módon három hosszúság mérésén alapszik. A táblázatok teljesége lehetővé teszi, hogy megállapítsuk a hosszsméréshez szükséges olyan pontosságot, mellyel elkerüljük a hibákat az indexelésben. Továbbá a cikk megadja a tizenkét legsűrűbben betöltött reciprokrács-sík képeit a b. c. c., f. c. c., gyémánt, és h. c. p. szerkezetek mindegyikének megfelelően.

TARTALOMJEGYZÉK

1. Bevezetés	228
2. Az elektrondiffrakciós kép, mint reciprokrács-sík	228
3. A kétdimenziós rács jellemzése	231
4. A táblázatok kiszámítása	231
5. A diffrakciós kép szimmetriájának következményei	233
6. A diffrakciós képek értelmezése a táblázatok felhasználásával	242
7. Példa egy egykristály diffrakciós képének interpretálására	242
Köszönetnyilvánítás	268
Irodalom	268
A tér-centrált köbös (b. c. c.) szerkezet tizenkét legsűrűbben betöltött reciprokrács-síkjának képe	260
A lapcentrált köbös (f. c. c.) szerkezet tizenkét legsűrűbben betöltött reciprokrács-síkjának képe	262
A gyémánt szerkezet tizenkét legsűrűbben betöltött reciprokrács-síkjának képe	264
A hatszöges (h. c. p.) szerkezet tizenkét legsűrűbben betöltött reciprokrács-síkjának képe	266
1. Táblázat. Tér-centrált köbös rács (b. c. c.)	236
2. Táblázat. Lapcentrált köbös rács (f. c. c.)	243
3. Táblázat. Gyémánt rács.	250
4. Táblázat. Legsorosabb illeszkedésű hatszöges (h. c. p.) rács	257

* Ez a cikk bővített változata az [1] dolgozatnak, amely az UNESCO anyagi támogatásával készült. (UNESCO Pilot Project on the Teaching of Crystallography in Relation to the Physics and Chemistry of Solids).

1. Bevezetés

Az egykristályokról kapott elektrondiffrakciós képek kétdimenziós pontrácsban elhelyezett „pontok”-ból állnak. Ismerve a minta szerkezetét, ezeknek a diffrakciós képeknek az interpretálása lehetővé teszi, hogy a mintának az elektronsugárhoz viszonyított orientációját meghatározzuk.

A diffrakciós képek értelmezéséhez (azaz a Laue indexeknek* az egyes foltokhoz való hozzárendeléséhez és a beeső nyalábbal párhuzamos krisztallográfiai irányok meghatározásához) bizonyos tapasztalatokra van szükség. Ezért érdemesnek látszik olyan szisztematikus eljárást kidolgozni, amely a fémek elektronmikroszkópiájában leggyakrabban előforduló anyagokra megkönnyíti az egykristály-diffrakciós képek gyors és helyes indexelését.

Ezért számoltuk ki a táblázatok adatait, amelyek lehetővé teszik az elektrondiffrakciós képek indexelését a képen mért három hossz hányadosai alapján. A táblázatokat elkészítettük minden egyparaméteres rácsra (b. c. c., f. c. c., gyémánt és hexagonális szerkezetekre, az utóbbinál $c/a = \sqrt{8/3}$ és ezek a táblázatok egy pontosági becslést tesznek lehetővé, amely megmutatja, hogy mely értékig lehet a helyes indexelést garantálni.

2. Az elektrondiffrakciós kép, mint reciprokrács-sík

Essen az elektronnyaláb a kristályra az \vec{n}_0 egységvektor irányában. Az elektrondiffrakció elmélete szerint [3, 4] a diffrakciós maximum az \vec{n} egységvektor irányában jelenik meg, ha az

$$\frac{\vec{n} - \vec{n}_0}{\lambda} = \vec{h} \quad (1)$$

egyenlet kielégül, ahol \vec{h} a reciprokrács vektor és λ az elektronok hullámhossza. Az \vec{n} irányát az (1) egyenleten alapuló egyszerű geometriai megfontolás felhasználásával meg lehet határozni. (A reflexiós gömb megszerkesztése: A reciprokrács O kezdőpontján keresztül húzzuk meg az $1/\lambda$ sugarú gömböt (ϱ) és akkor $\vec{CO} = \frac{\vec{n}_0}{\lambda}$

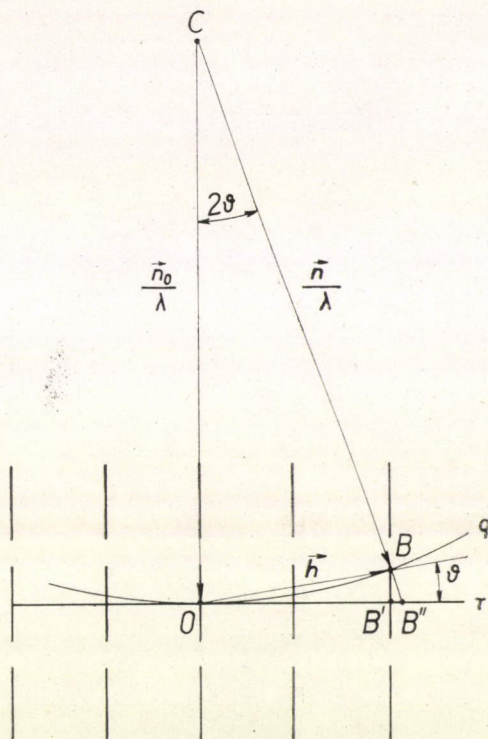
(1. ábra). Ekkor az (1) egyenletből nyilvánvaló, hogy a diffrakciós maximum a \vec{CB} irányban jelenik meg, ahol B a ϱ gömbön levő reciprokrács-pont.)

Szigorúan véve, a reciprokrács pontjai csak nagyon ritkán esnek össze a reflexiós gömbbel. Azonban a véges méretű kristályok diffrakciójának geometriai elméletében az infinitézimalis rács-pontokat véges tartományokkal lehet helyettesíteni. Ezek mérete egy bizonyos irányban az ugyanabba az irányba eső kristálméret reciprokértékével egyenlő ([3] 461. old., [4] 97. old.) Például ha a kristály egy lapos lemez, akkor a reciprokrács pontjai botszerű vonalak. A reflexiós gömb mindig metsz néhányat ezekből a kiterjedt „pontok”-ból úgy, hogy néhány elhajlított nyaláb mindig láthatóvá válik.

A 100 kV-os gyorsítófeszültség-tartományban a reflektáló gömb sugara nagy a reciprokrácsban levő szomszédos pontok közötti távolságokhoz viszonyítva. Ezek-

* Ellentétben a Miller indexekkel, a Laue indexeknek egynél nagyobb közös osztója lehet [2].

ben az esetekben ϱ reflexiós gömb egy τ síkkal közelíthető meg, amely a reciprokrács O kezdőpontján megy át. Így valamennyi elhajlított sugár közelítőleg a τ síkkal egybeeső reciprokrács-pontok felé irányul. A τ sík azonban a reciprokrács-síkja és ezért azt egy kétdimenziós rács alkotja.



1. ábra. Reflexiós gömb megszerkesztése

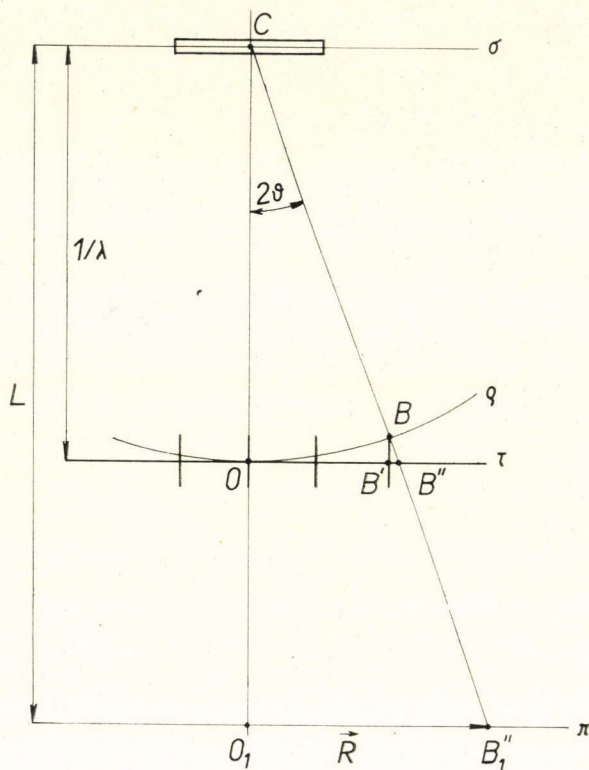
A 2. ábra vázlatosan az elektrondiffrakciós képek felvételére szolgáló kísérleti elrendezést mutatja. A fényképező lemez a π síkban van és merőleges a beeső nyalábra. A mintának a fényképező lemeztől való távolsága L . A π sík párhuzamos a τ síkkal. Ezért a diffrakciós képet azok a pontok hozzák létre, amelyek a közelítőleg kétdimenziós τ reciprokrács-síkban vannak. A π síkban a lépték a τ -hoz viszonyítva $L\lambda$, miként az a CO_1B_1'' és COB'' háromszögek hasonlóságából látható.

Vizsgáljuk meg a diffrakciós foltok relatív eltolódását, amely azáltal keletkezett, hogy a reflexiós gömböt a τ síkkal helyettesítettük. Felhasználva a $\lambda = 2d \sin \vartheta$ Bragg egyenletet és a $\tan 2\vartheta = R/L$ feltételt (lásd a 2. ábrát) a $B'B''/OB$ relatív eltolódást a következő formában kapjuk: (lásd az 1. ábrát)

$$\frac{B'B''}{OB} = 2 \sin^2 \vartheta = \frac{1}{2} \left(\frac{\lambda}{d} \right)^2 = \frac{1}{2} \left(\frac{R}{L} \right)^2$$

Ezekből a kifejezésekből nyilvánvaló, hogy a ϱ reflexiós gömbnek a tangenciális

τ síkkal való közelítése annál pontosabb, minél nagyobb a kristályrác-síkok d távolsága, azaz minél kisebb a diffrakciós pontnak a diffrakciós kép O centrumától mért R távolsága. Ezért a diffrakciós kép középső része a legfontosabb a minta orientációjának meghatározásához. A diffrakciós kép külső részein más reciprokrác-síkhöz tartozó pontok is megjelenhetnek, ezért ezek nem alkalmasak a minta orientációjának meghatározására.

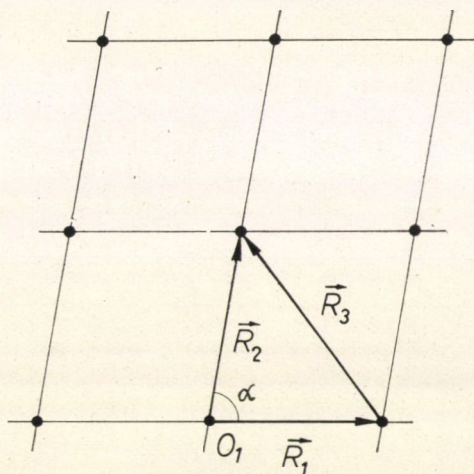


2. ábra. A diffrakciós képek felvételére szolgáló kísérleti elrendezés geometriája

A kristály-geometriából jól ismert, hogy a kristályrácban levő $[u \ v \ w]$ irány merőleges az ugyanazon Miller indexekkel $(u \ v \ w)$ rendelkező reciprokrác-síkokra [4]. A beeső sugárral párhuzamos $[u \ v \ w]$ kristálytani irányt megtaláljuk, ha a diffrakciós kép által reprezentált reciprokrác-sík $[u \ v \ w]$ Miller indexei ismertek. Ezért elegendő, ha megvizsgáljuk a reciprokrác-síkokat és szisztematikusan elrendezzük azokat.

3. A kétdimenziós rács jellemzése

Tekintve egy háromdimenziós rácsot, a rács-sík alap parallelogrammájának alakja nemcsak a Miller indexektől függ, de a rácsparaméterek hányadosától és a kristallográfiai tengelyek szögeitől is. Egyparaméteres rácsnál pusztán a Miller indexek meghatározzák azt. Ezért csak az egyparaméteres térrácsoknak megfelelő reciprokrács-síkokat vizsgáltuk (azaz a b. c. c., f. c. c., gyémánt, és h. c. p. rácsokat, az utóbbinál $c/a = \sqrt{8/3}$).



3. ábra. A kétdimenziós rács jellemzése

A diffrakciós képen a legkönnyebben mérhető mennyiség a hosszúság. Ezért a kétdimenziós rácsot a hegyesszögű háromszög oldalainak $R_1:R_2:R_3$ arányával jellemezzük, amely oldalak közül a kétdimenziós rács két legrövidebb vektora R_1 és R_2 (lásd a 3. ábrát). Valamennyi rács-síkot növekvő $R_1:R_2$ hányados szerint rendeztünk el. Ha több rács-sík ugyanazzal az $R_1:R_2$ hányadossal rendelkezik, akkor azokat növekvő $R_1:R_3$ hányados szerint rendeztük el.

4. A táblázatok kiszámítása

A táblázatok számítása a következő megfontoláson alapszik: a reciprokrács vektorok hosszának sorozata diszkrét, azaz a b. c. c. rácsban a legrövidebb vektorra vonatkozó ezen hosszúságok $1:\sqrt{2}:\sqrt{3}:\dots$ arányban vannak. A diffrakciós kép a kezdőpont közelében levő rács-sík részletet reprezentálja csak. Következésképpen észszerű valahogy korlátozni az R_1 és R_2 vektorok hosszát. Ezen korlátozás következtében csak véges számú olyan hegyesszögű háromszög vehető fel, amelynek R_1 , R_2 , R_3 oldala arányos a reciprokrács vektorok hosszával. Azonban az ezen háromszö-

gek által meghatározott kétdimenziós rácsok közül nem mindegyik képezi egy háromdimenziós rács síkjait. Ehhez ki kell elégíteni

$$\vec{R}_3 = \vec{R}_2 - \vec{R}_1 \quad (2)$$

feltételt. Egy rácsban legfeljebb N ekvivalens rácsvektor van, ahol N a rács szimmetria-csoportjának a rendje. Tehát az R_1 , R_2 , R_3 vektorok mindegyikét legfeljebb N -féleképpen választhatjuk és megvizsgáljuk, hogy a (2) feltételt kielégíti-e. Ily módon minden reciprokrács-síkot megtalálunk, és táblázatba rendezünk növekvő $R_1:R_2$ és $R_1:R_3$ hányados szerint. Az R_1 és R_2 hosszúságok tartományát b. c. c. rácsra $R_1, R_2 \leq 6 L\lambda/a$ -nak, f. c. c és gyémánt rácsra $R_1, R_2 \leq 8 L\lambda/a$ -nak és h. c. p. rácsra $R_1, R_2 = 3\sqrt{3} L\lambda/a$ -nak választottuk. (a jelöli a kristályrács paraméterét.) Az ezeket a feltételeket kielégítő síkok száma elegendő a gyakorlati célokra és a rács-síkok táblázatát is még könnyű áttekinteni. A különböző köbös rácsokra vonatkozó táblázatok közelítőleg azonos terjedelműek. Ezekhez viszonyítva a h. c. p. rácsok táblázatai kevésbé kiterjedtek: a c/a hányados a legtöbb elemre alig különbözik a $\sqrt{8/3}$ értéktől és ez terjedelmesebb táblázat gyakorlati értékét csökkentené. A táblázat egyes oszlopai az általános rács-síkokra a következő adatokat adják: a kristályrács $[u \ v \ w]$ vektora (zónatengely), amely párhuzamos az elektronsugárral, az első oszlopban van megadva. A következő összefüggés alapján számítottuk:

$$[u \ v \ w] = \frac{1}{D} \left[\begin{vmatrix} k_1 & l_1 \\ k_2 & l_2 \end{vmatrix}, \begin{vmatrix} l_1 & h_1 \\ l_2 & h_2 \end{vmatrix}, \begin{vmatrix} h_1 & k_1 \\ h_2 & k_2 \end{vmatrix} \right] \quad (3)$$

ahol $D > 0$ a determinánsok legnagyobb közös osztója, és $h_1 k_1 l_1, h_2 k_2 l_2$ a reciprokrács-síkban fekvő, egymással $\alpha \leq 90^\circ$ -ot bezáró két legrövidebb, nem kollineáris rácsvektor végpontjainak koordinátái. A diffrakciós folt Laue indexeit reprezentáló $h_1 k_1 l_1, h_2 k_2 l_2$ szimbólumokat a második, illetve a harmadik oszlopból lehet kiolvasni. A negyedik oszlop az $R_1:R_2:R_3$ arányokat adja meg. Az \vec{R}_i vektorok közelítőleg $L\lambda$ léptékű reciprokrács vektorok. Tehát köbös kristályokra

$$R_i = \frac{L\lambda}{d_i} = \frac{L\lambda}{a} \sqrt{h_i^2 + k_i^2 + l_i^2} \quad (4)$$

Általában érvényes a hexagonális rácsokra

$$\frac{1}{d^2} = \frac{4}{3} \frac{h^2 + hk + k^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2}$$

A h. c. p. szerkezetekre, amelyeknél $c/a = \sqrt{8/3}$

$$R_i = \frac{L\lambda}{d_i} = \frac{L\lambda}{a \sqrt{24}} \sqrt{32(h_i^2 + h_i k_i + k_i^2) + 9l_i^2} \quad (5)$$

Köbös kristályok esetében a negyedik oszlopban levő számok a négyzetgyökök alatt a $h_i^2 + k_i^2 + l_i^2$ mennyiségeket jelentik. Négyzetgyökük tehát az $1/a$ léptékű reciprokrács vektor hossza. A h. c. p. rács esetében a $32(h_i^2 + h_i k_i + k_i^2) + 9l_i^2$ mennyiség az $1/a\sqrt{24}$ léptékű reciprokrács vektorok hossza. Az ötödik oszlop megadja a reciprokrács-sík két legrövidebb vektora, \vec{R}_1 és \vec{R}_2 által bezárt α szöget. Abból a tényből, hogy \vec{R}_1 és \vec{R}_2 a kétdimenziós rács legrövidebb vektorai következik, hogy $60^\circ \leq \alpha \leq 90^\circ$.

A gyakorlatban a diffrakciós képek rendszerint azokat az $(u v w)$ reciprokrács-síkokat reprezentálják, amelyeket a $h_i k_i l_i$ reflexiók legsűrűbben töltenek be. Ez az oka annak, hogy mindenegyes vizsgált szerkezetnél (b. c. c., f. c. c., gyémánt és h. c. p. szerkezetnél) a tizenkét legsűrűbben elfoglalt reciprokrács-sík képei fordulnak elő a táblázatokban.

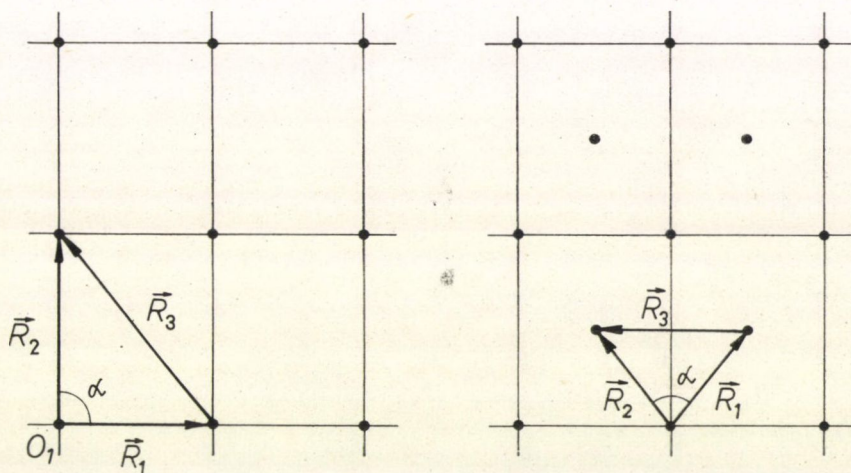
Megjegyzés: A h. c. p. rács szerkezeti tényezője 0, ha

$$h+2k = 3m, \quad l = 2n+1; \quad m, n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

A gyémántrács szerkezeti tényezője többek között 0 akkor is, ha

$$h+k+l = 2(2m+1); \quad m=0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Következésképpen ezeknek a reflexióknak nem kellene megjelenni a diffrakciós képekben. Kétszeres reflexió következtében azonban ezek a „tiltott” reflexiók is megjelenthetnek, ha azok hiánya a diffrakciós kép által reprezentált kétdimenziós rács



4. ábra. Derékszögű rácsok jellemzése

transzlációs szimmetriáját sérti. Ezek a reflexiók a reciprokrács-síkok képeiben keresztrel vannak jelölve. A táblázatokat a „tiltott” reflexiók megjelenésének feltételezésével állítottuk össze. Azokat az $(u v w)$ reciprokrács-síkokat, amelyek tartalmazhatják ezeket a „tiltott” reflexiókat, a táblázat első oszlopában keresztrel jelöltük meg.

5. A diffrakciós kép szimmetriájának következményei

Megtörténhet, hogy a kétdimenziós rácsnak $\alpha=90^\circ$ -os szöge van, vagy az $R_1 = R_2$ vagy az $R_2 = R_3$. Az ilyen típusú rácsot derékszögű rácsnak nevezzük, mert az elemi cellája derékszögű, vagy centráltan derékszögű (lásd a 4. ábrát). Nyilvánvaló, hogy a derékszögű rács-síkok tükör-szimmetriával rendelkeznek.

Azonban a nem derékszögű diffrakciós képnek nincs szimmetria síkja. Következésképpen az $\alpha \in (60^\circ, 90^\circ)$ -t bezáró két legrövidebb \vec{R}_1 és \vec{R}_2 vektor által alkotott

bázis jobbsodrású (az óramutató járásával ellentétes irányú) vagy balsodrású (az óramutató járásával egyező irányú) lehet. (Ahol R_1 a rövidebb vektor). Csupán a bázisok orientációjában különböző diffrakciós képek ugyanannak az $[u v w]$ kristály-zónának felelnek meg, de éppen ellentétes mintaállásnál. Tehát érdemes megkülönböztetni ezt a két képet. A táblázatban levő $[u v w]$ irány megegyezik az elektronsugár haladási irányával (a mintától a fényképező lemez felé mutat), ha a bázis \vec{R}_1 , \vec{R}_2 balsodrású, és ellentétes az elektronsugár haladási irányával, ha a bázis jobbsodrású. Derékszögű és centrált derékszögű rácsokban mind bal, mind pedig jobbsodrású bázist lehet választani úgy, hogy az elektronsugárral párhuzamos kristálytani irány irányításának értelme elvész.

A szimmetria-síkok hiánya következtében az általános rács diffrakciós képei csak bizonyos forgási szimmetriával rendelkeznek.

Általánosságban az $[u v w]$ -ből $[u' v' w']$ -be való átmenet \hat{A} matrixát bevezetve

$$\begin{pmatrix} u' \\ v' \\ w' \end{pmatrix} = \hat{A} \begin{pmatrix} u \\ v \\ w \end{pmatrix}$$

a rotáció megfelelő, ha a determináns $|\hat{A}|=1$ és nem megfelelő, ha $|\hat{A}|=-1$. A h_i , k_i , l_i indexek a következő összefüggés szerint transzformálódnak:

$$\begin{pmatrix} h'_i \\ k'_i \\ l'_i \end{pmatrix} = (\hat{A}^{-1})^T \begin{pmatrix} h_i \\ k_i \\ l_i \end{pmatrix}$$

Köbös rácsokon az \hat{A} mátrix ortogonális, azaz az $(\hat{A}^{-1})^T = \hat{A}$.

Köbös kristályokra a megfelelő rotációk az $[u v w]$ index következő változásának felelnek meg:

$$\begin{aligned} &[u \ v \ w] \quad [u \ \bar{v} \ \bar{w}] \quad [\bar{u} \ v \ \bar{w}] \quad [\bar{u} \ \bar{v} \ w] \\ &[w \ u \ v] \quad [w \ \bar{u} \ \bar{v}] \quad [\bar{w} \ u \ \bar{v}] \quad [\bar{w} \ \bar{u} \ v] \\ &[v \ w \ u] \quad [v \ \bar{w} \ \bar{u}] \quad [\bar{v} \ w \ \bar{u}] \quad [\bar{v} \ \bar{w} \ u] \\ &[\bar{v} \ \bar{u} \ \bar{w}] \quad [\bar{v} \ u \ w] \quad [v \ \bar{u} \ w] \quad [v \ u \ \bar{w}] \\ &[\bar{w} \ \bar{v} \ \bar{u}] \quad [\bar{w} \ v \ u] \quad [w \ \bar{v} \ u] \quad [w \ v \ \bar{u}] \\ &[\bar{u} \ \bar{w} \ \bar{v}] \quad [\bar{u} \ w \ v] \quad [u \ \bar{w} \ v] \quad [u \ w \ \bar{v}] \end{aligned} \tag{6}$$

Az

$$[\bar{u} \ \bar{v} \ \bar{w}], \quad [\bar{w} \ \bar{u} \ \bar{v}], \dots \tag{7}$$

változások nem megfelelő rotációknak felelnek meg. Az \vec{R}_i által jelzett diffrakciós pont h_i , k_i , l_i Laue-indexei ugyanazokat a kicserélődési szabályokat követik, mint az $[u v w]$ indexek.

Hatszöges rácsoknál a megfelelő rotációk az $[u\ v\ w]$ indexek következő változásainak felelnek meg: (a jobb oldalon ugyanabban a sorban meg van adva a $h_i\ k_i\ l_i$ Laue-indexek megfelelő kicserélődési szabálya: $i_i = -(h_i + k_i)$)

$$\begin{array}{lll}
 [u & v & w] \quad h_i \ k_i \ l_i \\
 [\bar{u} + v & \bar{u} & w] \quad k_i \ i_i \ l_i \\
 [\bar{v} & u + \bar{v} & w] \quad i_i \ h_i \ l_i \\
 [\bar{u} & \bar{v} & w] \quad \bar{h}_i \ \bar{k}_i \ l_i \\
 [u + \bar{v} & u & w] \quad \bar{k}_i \ \bar{l}_i \ l_i \\
 [v & \bar{u} + v & w] \quad \bar{l}_i \ \bar{h}_i \ l_i \\
 [v & u & \bar{w}] \quad k_i \ h_i \ \bar{l}_i \\
 [\bar{u} & \bar{u} + v & w] \quad i_i \ k_i \ l_i \\
 [u + \bar{v} & \bar{v} & w] \quad h_i \ i_i \ \bar{l}_i \\
 [\bar{v} & \bar{u} & \bar{w}] \quad \bar{k}_i \ \bar{h}_i \ l_i \\
 [u & u + \bar{v} & \bar{w}] \quad \bar{l}_i \ \bar{k}_i \ l_i \\
 [\bar{u} + v & v & \bar{w}] \quad \bar{h}_i \ \bar{l}_i \ l_i
 \end{array} \tag{8}$$

Az

$$\begin{array}{lll}
 [\bar{u} \ \bar{v} \ \bar{w}] & \bar{h}_i \ \bar{k}_i \ l_i \\
 \vdots \quad \vdots \quad \vdots & \vdots \quad \vdots \quad \vdots
 \end{array} \tag{9}$$

változások a nem megfelelő rotációknak felelnek meg.

A köbös szerkezetek táblázataiban (1, 2, 3 táblázat) az $[u\ v\ w]$ kombinációk oly módon vannak elrendezve, hogy az u, v, w számok mind pozitívak vagy mind negatívak és kielégítik az $|u| \leq |v| \leq w$ feltételt. Általános rács-síkok esetében ($60^\circ < \alpha < 90^\circ$, $R_1 \neq R_2 \neq R_3$) a kombináció huszonegy lehetőséget jelent, figyelembe véve a (6) és (7) összefüggéseket. A derékszögű ($\alpha = 90^\circ$) és centráltn derékszögű ($R_1 = R_2$, ill. $R_2 = R_3$) rács-síkok esetében az u, v, w számok pozitívak és a táblázatban adott $[u\ v\ w]$ kombináció negyvennyolc lehetőséget jelent, ugyancsak a (6) és (7) összefüggések értelmében.

A hatszöges szerkezetre vonatkozó táblázatokban (4. táblázat) az $[u\ v\ w]$ kombinációk oly módon vannak elrendezve, hogy $0 \leq u \leq v$, $0 \leq w$. Általános rács-sík esetében ($60^\circ < \alpha < 90^\circ$, $R_1 \neq R_2 \neq R_3 \neq R_1$) a táblázatban levő $[u\ v\ w]$ kombináció tizenkét olyan lehetőséget jelent, amely a (8) és (9) összefüggéseknek megfelel, a derékszögű ($\alpha = 90^\circ$) vagy a centráltn derékszögű ($R_1 = R_2$ vagy $R_2 = R_3$) esetben ez a kombináció huszonegy lehetőséget jelent a (8) és (9) összefüggések értelmében.

1. TÁBLÁZAT
Tér-centrált köbös rács (b.c.c.)

$[u \ v \ w]$	$h_1 \ k_1 \ l_1$	$h_2 \ k_2 \ l_2$	$R_1 : R_2 : R_3$	α
1 1 1	10 $\bar{1}$	01 $\bar{1}$	$\sqrt{2} : \sqrt{2} : \sqrt{2} = 1 : 1 : 1$	60° 00'
9 15 25	05 $\bar{3}$	$\bar{3}$ 30	$\sqrt{34} : \sqrt{34} : \sqrt{38} = 1 : 1 : 1.057$	63° 49'
9 11 23	1 $\bar{5}$ 2	5 $\bar{2}$ $\bar{1}$	$\sqrt{30} : \sqrt{30} : \sqrt{34} = 1 : 1 : 1.065$	64° 19'
5 13 19	14 $\bar{3}$	$\bar{4}$ 3 $\bar{1}$	$\sqrt{26} : \sqrt{26} : \sqrt{30} = 1 : 1 : 1.074$	64° 58'
1 5 23	5 $\bar{1}$ 0	34 $\bar{1}$	$\sqrt{26} : \sqrt{26} : \sqrt{30} = 1 : 1 : 1.074$	64° 58'
3 13 15	23 $\bar{3}$	$\bar{3}$ 3 $\bar{2}$	$\sqrt{22} : \sqrt{22} : \sqrt{26} = 1 : 1 : 1.087$	65° 51'
1 7 11	13 $\bar{2}$	$\bar{3}$ 2 $\bar{1}$	$\sqrt{14} : \sqrt{14} : \sqrt{18} = 1 : 1 : 1.134$	69° 04'
9 15 17	41 $\bar{3}$	$\bar{1}$ 4 $\bar{3}$	$\sqrt{26} : \sqrt{26} : \sqrt{34} = 1 : 1 : 1.144$	69° 45'
3 15 19	14 $\bar{3}$	5 $\bar{1}$ 0	$\sqrt{26} : \sqrt{26} : \sqrt{34} = 1 : 1 : 1.144$	69° 45'
2 7 10	50 $\bar{1}$	14 $\bar{3}$	$\sqrt{26} : \sqrt{26} : \sqrt{36} = 1 : 1 : 1.177$	72° 05'
1 3 9	03 $\bar{1}$	$\bar{3}$ 10	$\sqrt{10} : \sqrt{10} : \sqrt{14} = 1 : 1 : 1.183$	72° 33'
2 4 5	31 $\bar{2}$	$\bar{1}$ 3 $\bar{2}$	$\sqrt{14} : \sqrt{14} : \sqrt{20} = 1 : 1 : 1.195$	73° 24'
3 21 25	43 $\bar{3}$	$\bar{3}$ 4 $\bar{3}$	$\sqrt{34} : \sqrt{34} : \sqrt{50} = 1 : 1 : 1.213$	74° 39'
1 11 27	52 $\bar{1}$	$\bar{1}$ 5 $\bar{2}$	$\sqrt{30} : \sqrt{30} : \sqrt{46} = 1 : 1 : 1.238$	76° 30'
1 5 25	05 $\bar{1}$	$\bar{5}$ 10	$\sqrt{26} : \sqrt{26} : \sqrt{42} = 1 : 1 : 1.271$	78° 54'
11 13 19	34 $\bar{1}$	41 $\bar{3}$	$\sqrt{26} : \sqrt{26} : \sqrt{42} = 1 : 1 : 1.271$	78° 54'
1 3 5	21 $\bar{1}$	$\bar{1}$ 2 $\bar{1}$	$\sqrt{6} : \sqrt{6} : \sqrt{10} = 1 : 1 : 1.291$	80° 24'
4 6 13	51 $\bar{2}$	$\bar{1}$ 5 $\bar{2}$	$\sqrt{30} : \sqrt{30} : \sqrt{52} = 1 : 1 : 1.317$	82° 20'
1 5 13	32 $\bar{1}$	$\bar{2}$ 3 $\bar{1}$	$\sqrt{14} : \sqrt{14} : \sqrt{26} = 1 : 1 : 1.363$	85° 54'
5 7 11	23 $\bar{1}$	31 $\bar{2}$	$\sqrt{14} : \sqrt{14} : \sqrt{26} = 1 : 1 : 1.363$	85° 54'
3 5 17	41 $\bar{1}$	$\bar{1}$ 4 $\bar{1}$	$\sqrt{18} : \sqrt{18} : \sqrt{34} = 1 : 1 : 1.374$	86° 49'
1 7 25	43 $\bar{1}$	$\bar{3}$ 4 $\bar{1}$	$\sqrt{26} : \sqrt{26} : \sqrt{50} = 1 : 1 : 1.387$	87° 48'
3 7 29	52 $\bar{1}$	$\bar{2}$ 5 $\bar{1}$	$\sqrt{30} : \sqrt{30} : \sqrt{58} = 1 : 1 : 1.390$	88° 05'
0 0 1	110	$\bar{1}$ 10	$\sqrt{2} : \sqrt{2} : \sqrt{4} = 1 : 1 : 1.414$	90° 00'
6 10 11	530	424	$\sqrt{34} : \sqrt{36} : \sqrt{42} = 1 : 1.029 : 1.111$	66° 25'
2 9 14	343	422	$\sqrt{34} : \sqrt{36} : \sqrt{50} = 1 : 1.029 : 1.213$	73° 23'
3 5 16	530	442	$\sqrt{34} : \sqrt{36} : \sqrt{54} = 1 : 1.029 : 1.260$	76° 47'
5 11 12	334	442	$\sqrt{34} : \sqrt{36} : \sqrt{54} = 1 : 1.029 : 1.260$	76° 47'
6 10 13	530	244	$\sqrt{34} : \sqrt{36} : \sqrt{66} = 1 : 1.029 : 1.393$	86° 43'
3 10 14	433	442	$\sqrt{34} : \sqrt{36} : \sqrt{66} = 1 : 1.029 : 1.393$	86° 43'
3 6 7	420	323	$\sqrt{20} : \sqrt{22} : \sqrt{26} = 1 : 1.049 : 1.140$	67° 35'
2 4 9	420	332	$\sqrt{20} : \sqrt{22} : \sqrt{30} = 1 : 1.049 : 1.225$	73° 23'
3 6 8	420	233	$\sqrt{20} : \sqrt{22} : \sqrt{38} = 1 : 1.049 : 1.378$	84° 32'
1 4 8	411	042	$\sqrt{18} : \sqrt{20} : \sqrt{26} = 1 : 1.054 : 1.202$	71° 34'
1 2 9	141	420	$\sqrt{18} : \sqrt{20} : \sqrt{30} = 1 : 1.054 : 1.291$	77° 50'
3 4 8	411	042	$\sqrt{18} : \sqrt{20} : \sqrt{34} = 1 : 1.054 : 1.374$	83° 57'

1. Táblázat (folytatás)

$[u\ v\ w]$	$h_1\ k_1\ l_1$	$h_2\ k_2\ l_2$	$R_1 : R_2 : R_3$	α
$\bar{1}\ \bar{1}\bar{5}\ \bar{2}\bar{5}$	$5\bar{2}1$	$0\bar{5}3$	$\sqrt{30} : \sqrt{34} : \sqrt{38} = 1 : 1.065 : 1.125$	$65^\circ 59'$
$11\ 17\ 21$	$5\bar{2}\bar{1}$	$3\bar{3}\bar{4}$	$\sqrt{30} : \sqrt{34} : \sqrt{38} = 1 : 1.065 : 1.125$	$65^\circ 59'$
$7\ 15\ 25$	$51\bar{2}$	$0\bar{5}\bar{3}$	$\sqrt{30} : \sqrt{34} : \sqrt{42} = 1 : 1.065 : 1.183$	$69^\circ 51'$
$3\ 19\ 23$	$5\bar{2}1$	$4\bar{3}\bar{3}$	$\sqrt{30} : \sqrt{34} : \sqrt{42} = 1 : 1.065 : 1.183$	$69^\circ 51'$
$3\ 5\ 14$	$15\bar{2}$	$\bar{5}30$	$\sqrt{30} : \sqrt{34} : \sqrt{44} = 1 : 1.065 : 1.211$	$71^\circ 45'$
$5\ 6\ 13$	$5\bar{2}\bar{1}$	$34\bar{3}$	$\sqrt{30} : \sqrt{34} : \sqrt{44} = 1 : 1.065 : 1.211$	$71^\circ 45'$
$\bar{1}\bar{1}\ \bar{1}\bar{5}\ \bar{2}\bar{5}$	$5\bar{2}\bar{1}$	$0\bar{5}3$	$\sqrt{30} : \sqrt{34} : \sqrt{50} = 1 : 1.065 : 1.291$	$77^\circ 20'$
$3\ 5\ 31$	$25\bar{1}$	$\bar{5}30$	$\sqrt{30} : \sqrt{34} : \sqrt{54} = 1 : 1.065 : 1.342$	$81^\circ 00'$
$\bar{5}\ \bar{2}\bar{1}\ \bar{2}\bar{3}$	$51\bar{2}$	$34\bar{3}$	$\sqrt{30} : \sqrt{34} : \sqrt{54} = 1 : 1.065 : 1.342$	$81^\circ 00'$
$13\ 15\ 25$	$51\bar{2}$	$0\bar{5}\bar{3}$	$\sqrt{30} : \sqrt{34} : \sqrt{62} = 1 : 1.065 : 1.438$	$88^\circ 12'$
$1\ 9\ 23$	$4\bar{3}1$	$52\bar{1}$	$\sqrt{26} : \sqrt{30} : \sqrt{30} = 1 : 1.074 : 1.074$	$60^\circ 15'$
$\bar{3}\ \bar{5}\ \bar{2}\bar{5}$	$0\bar{5}\bar{1}$	$52\bar{1}$	$\sqrt{26} : \sqrt{30} : \sqrt{34} = 1 : 1.074 : 1.144$	$66^\circ 48'$
$5\ 8\ 9$	$14\bar{3}$	$5\bar{2}\bar{1}$	$\sqrt{26} : \sqrt{30} : \sqrt{36} = 1 : 1.074 : 1.177$	$69^\circ 01'$
$\bar{1}\ \bar{5}\ \bar{1}\bar{2}$	$5\bar{1}0$	$1\bar{5}2$	$\sqrt{26} : \sqrt{30} : \sqrt{36} = 1 : 1.074 : 1.177$	$69^\circ 01'$
$\bar{5}\ 7\ \bar{2}\bar{5}$	$50\bar{1}$	$2\bar{5}1$	$\sqrt{26} : \sqrt{30} : \sqrt{38} = 1 : 1.074 : 1.209$	$71^\circ 12'$
$7\ 11\ 23$	$34\bar{1}$	$51\bar{2}$	$\sqrt{26} : \sqrt{30} : \sqrt{38} = 1 : 1.074 : 1.209$	$71^\circ 12'$
$5\ 9\ 25$	$50\bar{1}$	$15\bar{2}$	$\sqrt{26} : \sqrt{30} : \sqrt{42} = 1 : 1.074 : 1.271$	$75^\circ 29'$
$\bar{1}\bar{1}\ \bar{1}\bar{3}\ \bar{2}\bar{1}$	$14\bar{3}$	$51\bar{2}$	$\sqrt{26} : \sqrt{30} : \sqrt{42} = 1 : 1.074 : 1.271$	$75^\circ 29'$
$1\ 4\ 13$	$34\bar{1}$	$52\bar{1}$	$\sqrt{26} : \sqrt{30} : \sqrt{44} = 1 : 1.074 : 1.301$	$77^\circ 36'$
$1\ 8\ 11$	$14\bar{3}$	$5\bar{2}\bar{1}$	$\sqrt{26} : \sqrt{30} : \sqrt{44} = 1 : 1.074 : 1.301$	$77^\circ 36'$
$1\ 5\ 27$	$5\bar{1}0$	$25\bar{1}$	$\sqrt{26} : \sqrt{30} : \sqrt{46} = 1 : 1.074 : 1.330$	$79^\circ 41'$
$\bar{5}\ \bar{1}\bar{7}\ \bar{2}\bar{1}$	$14\bar{3}$	$51\bar{2}$	$\sqrt{26} : \sqrt{30} : \sqrt{46} = 1 : 1.074 : 1.330$	$79^\circ 41'$
$11\ 17\ 19$	$14\bar{3}$	$51\bar{2}$	$\sqrt{26} : \sqrt{30} : \sqrt{50} = 1 : 1.074 : 1.387$	$83^\circ 50'$
$\bar{5}\ \bar{1}\bar{1}\ \bar{2}\bar{5}$	$50\bar{1}$	$1\bar{5}2$	$\sqrt{26} : \sqrt{30} : \sqrt{50} = 1 : 1.074 : 1.387$	$83^\circ 50'$
$2\ 3\ 5$	$22\bar{2}$	$23\bar{1}$	$\sqrt{12} : \sqrt{14} : \sqrt{18} = 1 : 1.080 : 1.225$	$72^\circ 02'$
$1\ 4\ 5$	$22\bar{2}$	$32\bar{1}$	$\sqrt{12} : \sqrt{14} : \sqrt{26} = 1 : 1.080 : 1.472$	$90^\circ 00'$
$9\ 11\ 17$	$23\bar{3}$	$34\bar{1}$	$\sqrt{22} : \sqrt{26} : \sqrt{30} = 1 : 1.087 : 1.168$	$67^\circ 54'$
$\bar{3}\ \bar{1}\bar{5}\ \bar{1}\bar{7}$	$23\bar{3}$	$5\bar{1}0$	$\sqrt{22} : \sqrt{26} : \sqrt{34} = 1 : 1.087 : 1.243$	$72^\circ 59'$
$5\ 9\ 21$	$33\bar{2}$	$34\bar{1}$	$\sqrt{22} : \sqrt{26} : \sqrt{38} = 1 : 1.087 : 1.314$	$77^\circ 56'$
$\bar{7}\ \bar{1}\bar{5}\ \bar{1}\bar{7}$	$32\bar{3}$	$4\bar{3}1$	$\sqrt{22} : \sqrt{26} : \sqrt{42} = 1 : 1.087 : 1.382$	$82^\circ 47'$
$5\ 6\ 9$	$32\bar{3}$	$34\bar{1}$	$\sqrt{22} : \sqrt{26} : \sqrt{44} = 1 : 1.087 : 1.414$	$85^\circ 12'$
$\bar{3}\ \bar{1}\bar{1}\ \bar{2}\bar{1}$	$33\bar{2}$	$4\bar{3}1$	$\sqrt{22} : \sqrt{26} : \sqrt{46} = 1 : 1.087 : 1.446$	$87^\circ 36'$
$6\ 8\ 11$	$51\bar{2}$	$24\bar{4}$	$\sqrt{30} : \sqrt{36} : \sqrt{38} = 1 : 1.095 : 1.125$	$64^\circ 47'$
$\bar{3}\ 4\ \bar{1}\bar{4}$	$2\bar{5}1$	$44\bar{2}$	$\sqrt{30} : \sqrt{36} : \sqrt{38} = 1 : 1.095 : 1.125$	$64^\circ 47'$
$1\ 3\ 4$	$3\bar{1}0$	$22\bar{2}$	$\sqrt{10} : \sqrt{12} : \sqrt{14} = 1 : 1.095 : 1.183$	$68^\circ 35'$
$\bar{2}\ \bar{1}\bar{1}\ \bar{1}\bar{2}$	$5\bar{2}1$	$24\bar{4}$	$\sqrt{30} : \sqrt{36} : \sqrt{62} = 1 : 1.095 : 1.438$	$86^\circ 31'$
$\bar{1}\ \bar{1}\bar{1}\ \bar{1}\bar{5}$	$41\bar{1}$	$3\bar{3}2$	$\sqrt{18} : \sqrt{22} : \sqrt{26} = 1 : 1.106 : 1.202$	$69^\circ 24'$

1. Táblázat (folytatás)

[u v w]			$h_1 k_1 l_1$	$h_2 k_2 l_2$	$R_1 : R_2 : R_3$	α
1	2	7	32 $\bar{1}$	$\bar{1}4\bar{1}$	$\sqrt{14} : \sqrt{18} : \sqrt{20} = 1 : 1.134 : 1.195$	67° 47'
5	9	11	132	4 $\bar{1}\bar{1}$	$\sqrt{14} : \sqrt{18} : \sqrt{22} = 1 : 1.134 : 1.254$	71° 39'
3	7	$\bar{1}\bar{3}$	132	4 $\bar{1}\bar{1}$	$\sqrt{14} : \sqrt{18} : \sqrt{26} = 1 : 1.134 : 1.363$	79° 07'
$\bar{1}$	9	$\bar{1}\bar{3}$	132	4 $\bar{1}\bar{1}$	$\sqrt{14} : \sqrt{18} : \sqrt{30} = 1 : 1.134 : 1.464$	86° 23'
4	5	8	40 $\bar{2}$	143	$\sqrt{20} : \sqrt{26} : \sqrt{26} = 1 : 1.140 : 1.140$	63° 59'
1	2	10	420	43 $\bar{1}$	$\sqrt{20} : \sqrt{26} : \sqrt{26} = 1 : 1.140 : 1.140$	63° 59'
1	5	10	042	510	$\sqrt{20} : \sqrt{26} : \sqrt{38} = 1 : 1.140 : 1.378$	79° 54'
1	2	11	420	34 $\bar{1}$	$\sqrt{20} : \sqrt{26} : \sqrt{38} = 1 : 1.140 : 1.378$	79° 54'
4	7	8	40 $\bar{2}$	$\bar{1}4\bar{3}$	$\sqrt{20} : \sqrt{26} : \sqrt{42} = 1 : 1.140 : 1.449$	84° 58'
2	3	$\bar{1}\bar{0}$	042	50 $\bar{1}$	$\sqrt{20} : \sqrt{26} : \sqrt{42} = 1 : 1.140 : 1.449$	84° 58'
2	9	$\bar{1}\bar{0}$	50 $\bar{1}$	343	$\sqrt{26} : \sqrt{34} : \sqrt{36} = 1 : 1.144 : 1.177$	66° 12'
6	7	10	341	503	$\sqrt{26} : \sqrt{34} : \sqrt{36} = 1 : 1.144 : 1.177$	66° 12'
3	3	27	43 $\bar{1}$	530	$\sqrt{26} : \sqrt{34} : \sqrt{38} = 1 : 1.144 : 1.209$	68° 17'
3	15	23	510	343	$\sqrt{26} : \sqrt{34} : \sqrt{38} = 1 : 1.144 : 1.209$	68° 17'
9	15	23	143	530	$\sqrt{26} : \sqrt{34} : \sqrt{46} = 1 : 1.144 : 1.330$	76° 23'
$\bar{1}\bar{3}$	$\bar{1}\bar{3}$	21	341	334	$\sqrt{26} : \sqrt{34} : \sqrt{46} = 1 : 1.144 : 1.330$	76° 23'
3	$\bar{1}\bar{3}$	23	510	053	$\sqrt{26} : \sqrt{34} : \sqrt{50} = 1 : 1.144 : 1.387$	80° 19'
6	9	$\bar{1}\bar{0}$	143	503	$\sqrt{26} : \sqrt{34} : \sqrt{52} = 1 : 1.144 : 1.414$	82° 16'
3	8	12	431	433	$\sqrt{26} : \sqrt{34} : \sqrt{52} = 1 : 1.144 : 1.414$	82° 16'
3	5	29	34 $\bar{1}$	530	$\sqrt{26} : \sqrt{34} : \sqrt{54} = 1 : 1.144 : 1.441$	84° 12'
9	$\bar{1}\bar{3}$	23	341	433	$\sqrt{26} : \sqrt{34} : \sqrt{54} = 1 : 1.144 : 1.441$	84° 12'
9	$\bar{1}\bar{9}$	21	431	334	$\sqrt{26} : \sqrt{34} : \sqrt{58} = 1 : 1.144 : 1.494$	88° 04'
2	8	9	332	512	$\sqrt{22} : \sqrt{30} : \sqrt{36} = 1 : 1.168 : 1.279$	71° 51'
$\bar{1}$	$\bar{1}\bar{3}$	21	332	521	$\sqrt{22} : \sqrt{30} : \sqrt{38} = 1 : 1.168 : 1.314$	74° 11'
9	$\bar{1}\bar{3}$	$\bar{1}\bar{9}$	233	521	$\sqrt{22} : \sqrt{30} : \sqrt{38} = 1 : 1.168 : 1.314$	74° 11'
3	$\bar{1}\bar{7}$	$\bar{1}\bar{9}$	233	521	$\sqrt{22} : \sqrt{30} : \sqrt{50} = 1 : 1.168 : 1.508$	87° 46'
4	9	$\bar{1}\bar{1}$	431	244	$\sqrt{26} : \sqrt{36} : \sqrt{46} = 1 : 1.177 : 1.330$	74° 51'
2	10	11	510	244	$\sqrt{26} : \sqrt{36} : \sqrt{50} = 1 : 1.177 : 1.387$	78° 41'
2	3	$\bar{1}\bar{4}$	341	442	$\sqrt{26} : \sqrt{36} : \sqrt{50} = 1 : 1.177 : 1.387$	78° 41'
1	6	14	431	442	$\sqrt{26} : \sqrt{36} : \sqrt{58} = 1 : 1.177 : 1.494$	86° 15'
7	8	11	341	424	$\sqrt{26} : \sqrt{36} : \sqrt{62} = 1 : 1.177 : 1.544$	90° 00'
3	5	9	30 $\bar{1}$	132	$\sqrt{10} : \sqrt{14} : \sqrt{14} = 1 : 1.183 : 1.183$	65° 00'
1	3	11	310	231	$\sqrt{10} : \sqrt{14} : \sqrt{18} = 1 : 1.183 : 1.342$	75° 19'
3	7	9	30 $\bar{1}$	132	$\sqrt{10} : \sqrt{14} : \sqrt{22} = 1 : 1.183 : 1.483$	85° 09'
3	4	6	231	402	$\sqrt{14} : \sqrt{20} : \sqrt{22} = 1 : 1.195 : 1.254$	68° 59'
2	4	7	132	420	$\sqrt{14} : \sqrt{20} : \sqrt{30} = 1 : 1.195 : 1.464$	83° 08'
$\bar{1}$	2	8	231	420	$\sqrt{14} : \sqrt{20} : \sqrt{30} = 1 : 1.195 : 1.464$	83° 08'

1. Táblázat (folytatás)

$[u\ v\ w]$	$h_1\ k_1\ l_1$	$h_2\ k_2\ l_2$	$R_1 : R_2 : R_3$	α
3 5 6	132	402	$\sqrt{14} : \sqrt{20} : \sqrt{34} = 1 : 1.195 : 1.558$	90° 00'
1 5 19	141	510	$\sqrt{18} : \sqrt{26} : \sqrt{26} = 1 : 1.202 : 1.202$	65° 25'
3 7 19	411	341	$\sqrt{18} : \sqrt{26} : \sqrt{30} = 1 : 1.202 : 1.291$	71° 07'
7 13 15	411	143	$\sqrt{18} : \sqrt{26} : \sqrt{34} = 1 : 1.202 : 1.374$	76° 38'
2 3 10	141	501	$\sqrt{18} : \sqrt{26} : \sqrt{36} = 1 : 1.202 : 1.414$	79° 21'
1 13 17	411	143	$\sqrt{18} : \sqrt{26} : \sqrt{38} = 1 : 1.202 : 1.453$	82° 02'
7 11 17	411	143	$\sqrt{18} : \sqrt{26} : \sqrt{38} = 1 : 1.202 : 1.453$	82° 02'
1 5 21	141	510	$\sqrt{18} : \sqrt{26} : \sqrt{42} = 1 : 1.202 : 1.528$	87° 21'
0 1 2	200	121	$\sqrt{4} : \sqrt{6} : \sqrt{6} = 1 : 1.225 : 1.225$	65° 54'
3 5 10	042	512	$\sqrt{20} : \sqrt{30} : \sqrt{34} = 1 : 1.225 : 1.304$	70° 56'
4 5 10	042	521	$\sqrt{20} : \sqrt{30} : \sqrt{38} = 1 : 1.225 : 1.378$	75° 49'
2 4 11	420	152	$\sqrt{20} : \sqrt{30} : \sqrt{38} = 1 : 1.225 : 1.378$	75° 49'
1 2 12	420	251	$\sqrt{20} : \sqrt{30} : \sqrt{46} = 1 : 1.225 : 1.517$	85° 19'
1 12 21	332	343	$\sqrt{22} : \sqrt{34} : \sqrt{38} = 1 : 1.243 : 1.314$	70° 47'
9 15 19	323	530	$\sqrt{22} : \sqrt{34} : \sqrt{38} = 1 : 1.243 : 1.314$	70° 47'
3 5 12	332	530	$\sqrt{22} : \sqrt{34} : \sqrt{44} = 1 : 1.243 : 1.414$	77° 20'
3 17 21	332	433	$\sqrt{22} : \sqrt{34} : \sqrt{50} = 1 : 1.243 : 1.508$	83° 42'
3 7 15	231	332	$\sqrt{14} : \sqrt{22} : \sqrt{26} = 1 : 1.254 : 1.363$	73° 27'
3 11 13	321	233	$\sqrt{14} : \sqrt{22} : \sqrt{30} = 1 : 1.254 : 1.464$	80° 09'
7 9 13	231	323	$\sqrt{14} : \sqrt{22} : \sqrt{30} = 1 : 1.254 : 1.464$	80° 09'
1 9 15	321	332	$\sqrt{14} : \sqrt{22} : \sqrt{34} = 1 : 1.254 : 1.558$	86° 44'
3 8 10	233	442	$\sqrt{22} : \sqrt{36} : \sqrt{38} = 1 : 1.279 : 1.314$	69° 11'
1 7 12	332	442	$\sqrt{22} : \sqrt{36} : \sqrt{50} = 1 : 1.279 : 1.508$	81° 50'
4 9 10	323	442	$\sqrt{22} : \sqrt{36} : \sqrt{54} = 1 : 1.279 : 1.567$	85° 56'
7 9 19	411	152	$\sqrt{18} : \sqrt{30} : \sqrt{34} = 1 : 1.291 : 1.374$	72° 28'
1 2 3	121	301	$\sqrt{6} : \sqrt{10} : \sqrt{12} = 1 : 1.291 : 1.414$	75° 02'
1 3 7	121	310	$\sqrt{6} : \sqrt{10} : \sqrt{14} = 1 : 1.291 : 1.528$	82° 35'
2 3 11	411	251	$\sqrt{18} : \sqrt{30} : \sqrt{44} = 1 : 1.291 : 1.563$	85° 04'
3 6 10	420	433	$\sqrt{20} : \sqrt{34} : \sqrt{34} = 1 : 1.304 : 1.304$	67° 27'
4 8 9	420	334	$\sqrt{20} : \sqrt{34} : \sqrt{42} = 1 : 1.304 : 1.449$	76° 42'
5 6 10	402	053	$\sqrt{20} : \sqrt{34} : \sqrt{42} = 1 : 1.304 : 1.449$	76° 42'
3 6 11	420	343	$\sqrt{20} : \sqrt{34} : \sqrt{46} = 1 : 1.304 : 1.517$	81° 11'
1 2 6	031	411	$\sqrt{10} : \sqrt{18} : \sqrt{20} = 1 : 1.342 : 1.414$	72° 40'
1 3 13	310	141	$\sqrt{10} : \sqrt{18} : \sqrt{26} = 1 : 1.342 : 1.612$	85° 44'
1 5 6	222	332	$\sqrt{12} : \sqrt{22} : \sqrt{26} = 1 : 1.354 : 1.472$	75° 45'
1 5 17	231	341	$\sqrt{14} : \sqrt{26} : \sqrt{26} = 1 : 1.363 : 1.363$	68° 29'
5 11 13	312	143	$\sqrt{14} : \sqrt{26} : \sqrt{26} = 1 : 1.363 : 1.363$	68° 29'

1. Táblázat (folytatás)

$[u v w]$	$h_1 k_1 l_1$	$h_2 k_2 l_2$	$R_1 : R_2 : R_3$	α
7 11 13	132	413	$\sqrt{14} : \sqrt{26} : \sqrt{30} = 1 : 1.363 : 1.464$	74° 48'
1 7 17	321	431	$\sqrt{14} : \sqrt{26} : \sqrt{30} = 1 : 1.363 : 1.464$	74° 48'
3 11 15	132	501	$\sqrt{14} : \sqrt{26} : \sqrt{34} = 1 : 1.363 : 1.558$	80° 57'
7 9 15	312	341	$\sqrt{14} : \sqrt{26} : \sqrt{34} = 1 : 1.363 : 1.558$	80° 57'
4 5 7	231	413	$\sqrt{14} : \sqrt{26} : \sqrt{36} = 1 : 1.363 : 1.604$	83° 59'
1 5 8	132	510	$\sqrt{14} : \sqrt{26} : \sqrt{36} = 1 : 1.363 : 1.604$	83° 59'
1 6 10	411	053	$\sqrt{18} : \sqrt{34} : \sqrt{36} = 1 : 1.374 : 1.414$	71° 08'
3 5 23	141	530	$\sqrt{18} : \sqrt{34} : \sqrt{38} = 1 : 1.374 : 1.453$	73° 34'
1 15 19	411	343	$\sqrt{18} : \sqrt{34} : \sqrt{42} = 1 : 1.374 : 1.528$	78° 20'
4 7 9	411	244	$\sqrt{18} : \sqrt{36} : \sqrt{38} = 1 : 1.414 : 1.453$	71° 41'
1 3 6	310	042	$\sqrt{10} : \sqrt{20} : \sqrt{22} = 1 : 1.414 : 1.483$	73° 34'
2 3 6	301	042	$\sqrt{10} : \sqrt{20} : \sqrt{26} = 1 : 1.414 : 1.612$	81° 52'
0 1 1	011	200	$\sqrt{2} : \sqrt{4} : \sqrt{6} = 1 : 1.414 : 1.732$	90° 00'
3 5 19	321	251	$\sqrt{14} : \sqrt{30} : \sqrt{34} = 1 : 1.464 : 1.558$	75° 53'
5 9 17	231	512	$\sqrt{14} : \sqrt{30} : \sqrt{34} = 1 : 1.464 : 1.558$	75° 53'
4 6 7	132	512	$\sqrt{14} : \sqrt{30} : \sqrt{36} = 1 : 1.464 : 1.604$	78° 45'
1 7 19	231	521	$\sqrt{14} : \sqrt{30} : \sqrt{38} = 1 : 1.464 : 1.648$	81° 35'
1 11 17	132	521	$\sqrt{14} : \sqrt{30} : \sqrt{38} = 1 : 1.464 : 1.648$	81° 35'
7 9 17	132	521	$\sqrt{14} : \sqrt{30} : \sqrt{42} = 1 : 1.464 : 1.732$	87° 12'
3 4 7	222	341	$\sqrt{12} : \sqrt{26} : \sqrt{30} = 1 : 1.472 : 1.581$	76° 55'
2 5 7	222	431	$\sqrt{12} : \sqrt{26} : \sqrt{38} = 1 : 1.472 : 1.780$	90° 00'
3 9 11	310	233	$\sqrt{10} : \sqrt{22} : \sqrt{26} = 1 : 1.483 : 1.612$	78° 20'
1 5 7	211	132	$\sqrt{6} : \sqrt{14} : \sqrt{14} = 1 : 1.528 : 1.528$	70° 54'
3 3 7	121	312	$\sqrt{6} : \sqrt{14} : \sqrt{18} = 1 : 1.528 : 1.732$	83° 44'
1 2 4	211	231	$\sqrt{6} : \sqrt{14} : \sqrt{20} = 1 : 1.528 : 1.826$	90° 00'
9 11 15	231	503	$\sqrt{14} : \sqrt{34} : \sqrt{34} = 1 : 1.558 : 1.558$	71° 17'
3 13 17	321	433	$\sqrt{14} : \sqrt{34} : \sqrt{42} = 1 : 1.558 : 1.732$	82° 06'
1 6 9	321	343	$\sqrt{14} : \sqrt{34} : \sqrt{44} = 1 : 1.558 : 1.773$	85° 46'
3 3 21	231	530	$\sqrt{14} : \sqrt{34} : \sqrt{46} = 1 : 1.558 : 1.813$	87° 22'
9 13 15	132	503	$\sqrt{14} : \sqrt{34} : \sqrt{46} = 1 : 1.558 : 1.813$	87° 22'
1 6 7	222	521	$\sqrt{12} : \sqrt{30} : \sqrt{34} = 1 : 1.581 : 1.683$	77° 50'
0 1 3	200	031	$\sqrt{4} : \sqrt{10} : \sqrt{14} = 1 : 1.581 : 1.871$	90° 00'
2 7 8	321	244	$\sqrt{14} : \sqrt{36} : \sqrt{38} = 1 : 1.604 : 1.648$	74° 30'
1 4 10	231	442	$\sqrt{14} : \sqrt{36} : \sqrt{38} = 1 : 1.604 : 1.648$	74° 30'
3 7 8	312	442	$\sqrt{14} : \sqrt{36} : \sqrt{42} = 1 : 1.604 : 1.732$	79° 44'
5 6 8	231	424	$\sqrt{14} : \sqrt{36} : \sqrt{46} = 1 : 1.604 : 1.813$	84° 53'
1 3 15	310	341	$\sqrt{10} : \sqrt{26} : \sqrt{26} = 1 : 1.612 : 1.612$	71° 56'

1. Táblázat (folytatás)

$[u\ v\ w]$	$h_1\ k_1\ l_1$	$h_2\ k_2\ l_2$	$R_1 : R_2 : R_3$	α
1 5 15	03 $\bar{1}$	$\bar{5}$ 10	$\sqrt{10} : \sqrt{26} : \sqrt{30} = 1 : 1.612 : 1.732$	79° 17'
$\bar{3}$ 9 13	3 $\bar{1}$ 0	$\bar{1}$ 43	$\sqrt{10} : \sqrt{26} : \sqrt{34} = 1 : 1.612 : 1.844$	86° 26'
$\bar{3}$ 5 15	03 $\bar{1}$	50 $\bar{1}$	$\sqrt{10} : \sqrt{26} : \sqrt{34} = 1 : 1.612 : 1.844$	86° 26'
5 6	30 $\bar{1}$	$\bar{1}$ 43	$\sqrt{10} : \sqrt{26} : \sqrt{36} = 1 : 1.612 : 1.897$	90° 00'
$\bar{3}$ 5 8	22 $\bar{2}$	530	$\sqrt{12} : \sqrt{34} : \sqrt{38} = 1 : 1.683 : 1.780$	78° 34'
1 1 3	1 $\bar{1}$ 0	21 $\bar{1}$	$\sqrt{2} : \sqrt{6} : \sqrt{6} = 1 : 1.732 : 1.732$	73° 13'
$\bar{1}$ 3 8	3 $\bar{1}$ 0	$\bar{1}$ 52	$\sqrt{10} : \sqrt{30} : \sqrt{36} = 1 : 1.732 : 1.897$	83° 22'
1 5 9	1 $\bar{2}$ 1	41 $\bar{1}$	$\sqrt{6} : \sqrt{18} : \sqrt{22} = 1 : 1.732 : 1.915$	84° 29'
1 3 17	3 $\bar{1}$ 0	25 $\bar{1}$	$\sqrt{10} : \sqrt{30} : \sqrt{38} = 1 : 1.732 : 1.949$	86° 41'
5 7 15	30 $\bar{1}$	152	$\sqrt{10} : \sqrt{30} : \sqrt{38} = 1 : 1.732 : 1.949$	86° 41'
2 3 4	1 $\bar{2}$ 1	40 $\bar{2}$	$\sqrt{6} : \sqrt{20} : \sqrt{22} = 1 : 1.826 : 1.915$	79° 29'
1 2 5	12 $\bar{1}$	420	$\sqrt{6} : \sqrt{20} : \sqrt{26} = 1 : 1.826 : 2.082$	90° 00'
5 9 15	30 $\bar{1}$	05 $\bar{3}$	$\sqrt{10} : \sqrt{34} : \sqrt{38} = 1 : 1.844 : 1.949$	80° 38'
0 2 3	200	13 $\bar{2}$	$\sqrt{4} : \sqrt{14} : \sqrt{14} = 1 : 1.871 : 1.871$	74° 30'
2 6 7	3 $\bar{1}$ 0	244	$\sqrt{10} : \sqrt{36} : \sqrt{42} = 1 : 1.897 : 2.049$	83° 57'
$\bar{1}$ 7 9	21 $\bar{1}$	332	$\sqrt{6} : \sqrt{22} : \sqrt{26} = 1 : 1.915 : 2.082$	85° 00'
1 5 11	12 $\bar{1}$	43 $\bar{1}$	$\sqrt{6} : \sqrt{26} : \sqrt{26} = 1 : 2.082 : 2.082$	76° 06'
5 7 9	121	4 $\bar{1}$ 3	$\sqrt{6} : \sqrt{26} : \sqrt{30} = 1 : 2.082 : 2.236$	85° 24'
$\bar{3}$ 5 11	21 $\bar{1}$	341	$\sqrt{6} : \sqrt{26} : \sqrt{30} = 1 : 2.082 : 2.236$	85° 24'
0 1 4	200	14 $\bar{1}$	$\sqrt{4} : \sqrt{18} : \sqrt{18} = 1 : 2.121 : 2.121$	76° 22'
1 3 3	0 $\bar{1}$ 1	3 $\bar{1}$ 0	$\sqrt{2} : \sqrt{10} : \sqrt{10} = 1 : 2.236 : 2.236$	77° 05'
3 7 11	1 $\bar{2}$ 1	51 $\bar{2}$	$\sqrt{6} : \sqrt{30} : \sqrt{34} = 1 : 2.236 : 2.380$	85° 44'
3 4 5	1 $\bar{2}$ 1	50 $\bar{3}$	$\sqrt{6} : \sqrt{34} : \sqrt{36} = 1 : 2.380 : 2.449$	81° 57'
1 9 11	21 $\bar{1}$	343	$\sqrt{6} : \sqrt{34} : \sqrt{38} = 1 : 2.380 : 2.517$	85° 59'
3 5 13	12 $\bar{1}$	530	$\sqrt{6} : \sqrt{34} : \sqrt{38} = 1 : 2.380 : 2.517$	85° 59'
$\bar{1}$ 4 6	21 $\bar{1}$	442	$\sqrt{6} : \sqrt{36} : \sqrt{38} = 1 : 2.449 : 2.517$	82° 11'
1 1 2	1 $\bar{1}$ 0	22 $\bar{2}$	$\sqrt{2} : \sqrt{12} : \sqrt{14} = 1 : 2.449 : 2.646$	90° 00'
0 3 4	200	143	$\sqrt{4} : \sqrt{26} : \sqrt{26} = 1 : 2.550 : 2.550$	78° 41'
0 1 5	200	05 $\bar{1}$	$\sqrt{4} : \sqrt{26} : \sqrt{30} = 1 : 2.550 : 2.739$	90° 00'
1 1 5	1 $\bar{1}$ 0	32 $\bar{1}$	$\sqrt{2} : \sqrt{14} : \sqrt{14} = 1 : 2.646 : 2.646$	79° 07'
0 2 5	200	15 $\bar{2}$	$\sqrt{4} : \sqrt{30} : \sqrt{30} = 1 : 2.739 : 2.739$	79° 29'
0 3 5	200	05 $\bar{3}$	$\sqrt{4} : \sqrt{34} : \sqrt{38} = 1 : 2.915 : 3.082$	90° 00'
1 2 2	0 $\bar{1}$ 1	4 $\bar{1}$ 1	$\sqrt{2} : \sqrt{18} : \sqrt{20} = 1 : 3 : 3.162$	90° 00'
3 3 5	1 $\bar{1}$ 0	323	$\sqrt{2} : \sqrt{22} : \sqrt{22} = 1 : 3.317 : 3.317$	81° 20'
1 5 5	0 $\bar{1}$ 1	5 $\bar{1}$ 0	$\sqrt{2} : \sqrt{26} : \sqrt{26} = 1 : 3.606 : 3.606$	82° 02'
1 1 7	1 $\bar{1}$ 0	43 $\bar{1}$	$\sqrt{2} : \sqrt{26} : \sqrt{26} = 1 : 3.606 : 3.606$	82° 02'
3 5 5	0 $\bar{1}$ 1	52 $\bar{1}$	$\sqrt{2} : \sqrt{30} : \sqrt{30} = 1 : 3.873 : 3.873$	82° 35'

(1. Táblázat folytatás)

$[u\ v\ w]$	$h_1\ k_1\ l_1$	$h_2\ k_2\ l_2$	$R_1 : R_2 : R_3$	α
3 3 7	1 $\bar{1}$ 0	43 $\bar{3}$	$\sqrt{2} : \sqrt{34} : \sqrt{34} = 1 : 4.123 : 4.123$	83° 02'
2 2 3	1 $\bar{1}$ 0	33 $\bar{4}$	$\sqrt{2} : \sqrt{34} : \sqrt{36} = 1 : 4.123 : 4.243$	90° 00'
1 1 4	1 $\bar{1}$ 0	44 $\bar{2}$	$\sqrt{2} : \sqrt{36} : \sqrt{38} = 1 : 4.243 : 4.359$	90° 00'

6. A diffrakciós képek értelmezése a táblázatok felhasználásával

Feltételezzük, hogy a minta szerkezete és az a rácsparaméter ismert. A diffrakciós kép alap-parallelogrammja oly módon választandó meg, hogy a két legrövidebb, nem kollineáris és egymással $\alpha \leq 90^\circ$ -ot bezáró \vec{R}_1, \vec{R}_2 képezze oldalait. Ezt a parallelogrammát két háromszögre lehet osztani a legrövidebb átlóval. Azután az $R_1 : R_2 : R_3$ arányt mérjük (3. ábra). Ezt az arányt összehasonlítjuk a szóban forgó kristályszerkezetre vonatkozó, a táblázat negyedik oszlopában szereplő arányokkal. Ha a mért $R_1 : R_2 : R_3$ arány hibája több $(u\ v\ w)$ reciprokrács-síkot enged meg, a megfelelő megtalálhatjuk a központi folttól a legközelebbi diffrakciós foltig való távolság szerint. (A legközelebbi foltnak az R távolságát közelítőleg $R = L\lambda/d$ adja meg. Köbös rácsokra $R = L\lambda[h^2 + k^2 + l^2]^{1/2}/a$; *h. c. p.* rácsra, ahol $c/a = \sqrt{8/3}$,

$$R = L\lambda[32(h^2 + hk + k^2) + 9l^2]^{1/2}/a\sqrt{24}.$$

A $[h^2 + k^2 + l^2]^{1/2}$ és $[32(h^2 + hk + k^2) + 9l^2]^{1/2}$ négyzetgyököket a negyedik oszlop első része adja meg és további kritériumként fel lehet használni. 7. pont.)

Ha a nem derékszögű rács ($60^\circ < \alpha < 90^\circ$, $R_1 \neq R_2 \neq R_3 \neq R_1$) \vec{R}_1, \vec{R}_2 bázisvektorai balsodrásúak, akkor a táblázati $[u\ v\ w]$ kristálytani irány (vagy a (6) vagy (8) összefüggésekből nyert egyéb irány) párhuzamos az elektronsugár irányával. Ha a nem derékszögű rács \vec{R}_1, \vec{R}_2 bázisvektorai jobbsodrásúak, akkor a táblázati iránynak ellentétes az irányítása, azaz a fotolemeztől a minta felé mutat. Az \vec{R}_1 és \vec{R}_2 vektorok végpontjainál levő diffrakciós folt $h_1 k_1 l_1, h_2 k_2 l_2$ Laue-indexeit a második és harmadik oszlopban jeleztük. Más foltok indexeit ezekből megfelelő lineáris kombinációval kaphatjuk meg. Ha a diffrakciós foltok derékszögű rácsban vannak elrendezve (azaz $\alpha = 90^\circ$, vagy $R_1 = R_2$, vagy $R_2 = R_3$), akkor az $[u\ v\ w]$ irány irányításáról (előjeléről) semmit sem lehet mondani. Tehát a táblázatban szereplő szimbólum a (6) és (7) összefüggésből adódó mind a 48 lehetőséget jelenti, ha a minta köbös rácsú, vagy a (8) és (9)-ből adódó 24 lehetőséget, ha a minta *h. c. p.* rácsú.

7. Példa egy egykristály diffrakciós képének interpretálására

Példaként az 5. ábrán szereplő elektrondiffrakciós kép interpretációját írjuk le. A képet határolt területű elektrondiffrakcióval kaptuk polikristályos rézlemez egy szemcséjéről. Feladat az, hogy meghatározzuk a vizsgált szemcsében azt az $[u\ v\ w]$ irányt, amely párhuzamos a beeső elektronsugárral és indexeljük a diffrakciós foltokat.

2. TÁBLÁZAT
Lapcentrált köbös rács (f.c.c.)

$[u\ v\ w]$	$h_1\ k_1\ l_1$	$h_2\ k_2\ l_2$	$R_1 : R_2 : R_3$	α
1 1 1	220	202	$\sqrt{8} : \sqrt{8} : \sqrt{8} = 1 : 1 : 1$	60° 00'
7 8 11	153	531	$\sqrt{35} : \sqrt{35} : \sqrt{36} = 1 : 1 : 1.014$	60° 56'
3 5 6	133	331	$\sqrt{19} : \sqrt{19} : \sqrt{20} = 1 : 1 : 1.026$	61° 44'
4 6 9	064	640	$\sqrt{52} : \sqrt{52} : \sqrt{56} = 1 : 1 : 1.038$	62° 31'
2 5 6	244	442	$\sqrt{36} : \sqrt{36} : \sqrt{40} = 1 : 1 : 1.054$	63° 37'
8 11 23	173	731	$\sqrt{59} : \sqrt{59} : \sqrt{68} = 1 : 1 : 1.074$	64° 56'
1 2 4	042	420	$\sqrt{20} : \sqrt{20} : \sqrt{24} = 1 : 1 : 1.095$	66° 25'
7 8 25	731	553	$\sqrt{59} : \sqrt{59} : \sqrt{72} = 1 : 1 : 1.105$	67° 03'
1 7 11	264	642	$\sqrt{56} : \sqrt{56} : \sqrt{72} = 1 : 1 : 1.134$	69° 05'
0 1 1	111	111	$\sqrt{3} : \sqrt{3} : \sqrt{4} = 1 : 1 : 1.155$	70° 32'
1 3 9	062	620	$\sqrt{40} : \sqrt{40} : \sqrt{56} = 1 : 1 : 1.183$	72° 33'
6 9 13	513	153	$\sqrt{35} : \sqrt{35} : \sqrt{52} = 1 : 1 : 1.219$	75° 06'
3 12 17	533	353	$\sqrt{43} : \sqrt{43} : \sqrt{68} = 1 : 1 : 1.258$	77° 55'
1 3 5	422	242	$\sqrt{24} : \sqrt{24} : \sqrt{40} = 1 : 1 : 1.291$	80° 24'
5 17 18	711	155	$\sqrt{51} : \sqrt{51} : \sqrt{88} = 1 : 1 : 1.314$	82° 07'
1 2 5	311	131	$\sqrt{11} : \sqrt{11} : \sqrt{20} = 1 : 1 : 1.348$	84° 47'
2 3 13	511	151	$\sqrt{27} : \sqrt{27} : \sqrt{52} = 1 : 1 : 1.388$	87° 53'
1 4 17	531	351	$\sqrt{35} : \sqrt{35} : \sqrt{68} = 1 : 1 : 1.394$	88° 22'
3 4 25	711	171	$\sqrt{51} : \sqrt{51} : \sqrt{100} = 1 : 1 : 1.400$	88° 53'
0 0 1	200	020	$\sqrt{4} : \sqrt{4} : \sqrt{8} = 1 : 1 : 1.414$	90° 00'
5 11 12	513	442	$\sqrt{35} : \sqrt{36} : \sqrt{51} = 1 : 1.014 : 1.207$	73° 38'
3 5 16	351	442	$\sqrt{35} : \sqrt{36} : \sqrt{51} = 1 : 1.014 : 1.207$	73° 38'
4 11 13	531	244	$\sqrt{35} : \sqrt{36} : \sqrt{59} = 1 : 1.014 : 1.298$	80° 16'
1 7 16	531	442	$\sqrt{35} : \sqrt{36} : \sqrt{59} = 1 : 1.014 : 1.298$	80° 16'
8 9 13	531	244	$\sqrt{35} : \sqrt{36} : \sqrt{67} = 1 : 1.014 : 1.384$	86° 46'
1 2 9	331	420	$\sqrt{19} : \sqrt{20} : \sqrt{27} = 1 : 1.026 : 1.192$	72° 04'
3 6 7	133	420	$\sqrt{19} : \sqrt{20} : \sqrt{35} = 1 : 1.026 : 1.357$	84° 07'
5 12 13	602	353	$\sqrt{40} : \sqrt{43} : \sqrt{59} = 1 : 1.037 : 1.214$	73° 11'
2 3 12	640	642	$\sqrt{52} : \sqrt{56} : \sqrt{68} = 1 : 1.038 : 1.144$	68° 15'
2 6 7	244	620	$\sqrt{36} : \sqrt{40} : \sqrt{68} = 1 : 1.054 : 1.374$	83° 57'
3 4 11	242	511	$\sqrt{24} : \sqrt{27} : \sqrt{35} = 1 : 1.061 : 1.208$	71° 41'
1 6 11	242	511	$\sqrt{24} : \sqrt{27} : \sqrt{43} = 1 : 1.061 : 1.339$	80° 58'
3 9 14	153	620	$\sqrt{35} : \sqrt{40} : \sqrt{43} = 1 : 1.069 : 1.108$	64° 41'
5 6 15	351	602	$\sqrt{35} : \sqrt{40} : \sqrt{43} = 1 : 1.069 : 1.108$	64° 41'
3 8 13	153	602	$\sqrt{35} : \sqrt{40} : \sqrt{51} = 1 : 1.069 : 1.207$	71° 18'
1 3 18	351	620	$\sqrt{35} : \sqrt{40} : \sqrt{59} = 1 : 1.069 : 1.298$	77° 39'

2. Táblázat (folytatás)

$[u \ v \ w]$	$h_1 \ k_1 \ l_1$	$h_2 \ k_2 \ l_2$	$R_1 : R_2 : R_3$	α
3 9 16	153	620	$\sqrt{35} : \sqrt{40} : \sqrt{67} = 1 : 1.069 : 1.384$	83° 52'
4 9 19	353	711	$\sqrt{43} : \sqrt{51} : \sqrt{56} = 1 : 1.089 : 1.141$	66° 04'
1 12 19	353	711	$\sqrt{43} : \sqrt{51} : \sqrt{68} = 1 : 1.089 : 1.258$	73° 53'
5 9 20	353	351	$\sqrt{43} : \sqrt{51} : \sqrt{68} = 1 : 1.089 : 1.258$	73° 53'
11 14 15	335	351	$\sqrt{43} : \sqrt{51} : \sqrt{84} = 1 : 1.089 : 1.398$	83° 52'
1 9 16	442	353	$\sqrt{36} : \sqrt{43} : \sqrt{51} = 1 : 1.093 : 1.190$	69° 09'
7 12 13	424	353	$\sqrt{36} : \sqrt{43} : \sqrt{59} = 1 : 1.093 : 1.280$	75° 17'
3 11 16	442	533	$\sqrt{36} : \sqrt{43} : \sqrt{75} = 1 : 1.093 : 1.443$	87° 05'
2 3 4	402	242	$\sqrt{20} : \sqrt{24} : \sqrt{36} = 1 : 1.095 : 1.342$	79° 29'
6 9 19	533	640	$\sqrt{43} : \sqrt{52} : \sqrt{59} = 1 : 1.100 : 1.171$	67° 38'
3 10 15	531	533	$\sqrt{35} : \sqrt{43} : \sqrt{52} = 1 : 1.108 : 1.219$	70° 25'
9 11 12	531	335	$\sqrt{35} : \sqrt{43} : \sqrt{56} = 1 : 1.108 : 1.265$	73° 32'
2 9 17	531	353	$\sqrt{35} : \sqrt{43} : \sqrt{72} = 1 : 1.108 : 1.434$	85° 34'
6 7 17	351	353	$\sqrt{35} : \sqrt{43} : \sqrt{72} = 1 : 1.108 : 1.434$	85° 34'
1 4 9	331	242	$\sqrt{19} : \sqrt{24} : \sqrt{27} = 1 : 1.124 : 1.192$	68° 00'
2 5 9	331	422	$\sqrt{19} : \sqrt{24} : \sqrt{35} = 1 : 1.124 : 1.357$	79° 12'
5 6 7	313	242	$\sqrt{19} : \sqrt{24} : \sqrt{35} = 1 : 1.124 : 1.357$	79° 12'
1 3 20	620	551	$\sqrt{40} : \sqrt{51} : \sqrt{51} = 1 : 1.129 : 1.129$	63° 43'
5 14 15	602	155	$\sqrt{40} : \sqrt{51} : \sqrt{59} = 1 : 1.129 : 1.214$	69° 15'
1 3 22	620	171	$\sqrt{40} : \sqrt{51} : \sqrt{75} = 1 : 1.129 : 1.369$	79° 48'
2 7 21	062	711	$\sqrt{40} : \sqrt{51} : \sqrt{75} = 1 : 1.129 : 1.369$	79° 48'
4 7 21	062	711	$\sqrt{40} : \sqrt{51} : \sqrt{83} = 1 : 1.129 : 1.440$	84° 55'
3 15 16	620	155	$\sqrt{40} : \sqrt{51} : \sqrt{83} = 1 : 1.129 : 1.440$	84° 55'
1 7 12	511	153	$\sqrt{27} : \sqrt{35} : \sqrt{36} = 1 : 1.139 : 1.155$	64° 59'
1 3 14	151	531	$\sqrt{27} : \sqrt{35} : \sqrt{40} = 1 : 1.139 : 1.217$	69° 02'
1 8 13	511	153	$\sqrt{27} : \sqrt{35} : \sqrt{56} = 1 : 1.139 : 1.440$	84° 24'
4 7 13	511	153	$\sqrt{27} : \sqrt{35} : \sqrt{56} = 1 : 1.139 : 1.440$	84° 24'
2 6 9	620	064	$\sqrt{40} : \sqrt{52} : \sqrt{68} = 1 : 1.140 : 1.304$	74° 45'
3 13 18	533	264	$\sqrt{43} : \sqrt{56} : \sqrt{59} = 1 : 1.141 : 1.171$	65° 57'
12 13 15	335	462	$\sqrt{43} : \sqrt{56} : \sqrt{67} = 1 : 1.141 : 1.248$	70° 58'
3 14 19	533	642	$\sqrt{43} : \sqrt{56} : \sqrt{75} = 1 : 1.141 : 1.321$	75° 51'
1 12 21	353	642	$\sqrt{43} : \sqrt{56} : \sqrt{83} = 1 : 1.141 : 1.389$	80° 37'
6 11 21	533	462	$\sqrt{43} : \sqrt{56} : \sqrt{91} = 1 : 1.141 : 1.455$	85° 19'
7 15 18	353	624	$\sqrt{43} : \sqrt{56} : \sqrt{91} = 1 : 1.141 : 1.455$	85° 19'
4 9 11	511	244	$\sqrt{27} : \sqrt{36} : \sqrt{43} = 1 : 1.155 : 1.262$	71° 18'
1 2 11	420	151	$\sqrt{20} : \sqrt{27} : \sqrt{35} = 1 : 1.162 : 1.323$	75° 02'
1 3 10	042	511	$\sqrt{20} : \sqrt{27} : \sqrt{35} = 1 : 1.162 : 1.323$	75° 02'

2. Táblázat (folytatás)

$[u\ v\ w]$	$h_1\ k_1\ l_1$	$h_2\ k_2\ l_2$	$R_1 : R_2 : R_3$	α
3 5 10	04 $\bar{2}$	$\bar{3}$ 11	$\sqrt{20} : \sqrt{27} : \sqrt{43} = 1 : 1.162 : 1.466$	85° 04'
9 15 16	353	7 $\bar{1}$ $\bar{3}$	$\sqrt{43} : \sqrt{59} : \sqrt{68} = 1 : 1.171 : 1.258$	70° 16'
8 $\bar{1}$ 5 $\bar{1}$ 7	353	$\bar{5}$ 35	$\sqrt{43} : \sqrt{59} : \sqrt{72} = 1 : 1.171 : 1.294$	72° 40'
1 1 4	220	31 $\bar{1}$	$\sqrt{8} : \sqrt{11} : \sqrt{11} = 1 : 1.173 : 1.173$	64° 46'
2 3 3	0 $\bar{2}$ 2	3 $\bar{1}$ $\bar{1}$	$\sqrt{8} : \sqrt{11} : \sqrt{19} = 1 : 1.173 : 1.541$	90° 00'
3 5 9	60 $\bar{2}$	264	$\sqrt{40} : \sqrt{56} : \sqrt{56} = 1 : 1.183 : 1.183$	65° 00'
1 3 11	620	46 $\bar{2}$	$\sqrt{40} : \sqrt{56} : \sqrt{72} = 1 : 1.183 : 1.342$	75° 19'
3 7 9	60 $\bar{2}$	264	$\sqrt{40} : \sqrt{56} : \sqrt{88} = 1 : 1.183 : 1.483$	85° 09'
4 $\bar{1}$ 3 $\bar{1}$ 5	244	7 $\bar{1}$ $\bar{1}$	$\sqrt{36} : \sqrt{51} : \sqrt{59} = 1 : 1.190 : 1.280$	70° 56'
8 11 15	244	$\bar{5}$ 5 $\bar{1}$	$\sqrt{36} : \sqrt{51} : \sqrt{59} = 1 : 1.190 : 1.280$	70° 56'
3 7 20	44 $\bar{2}$	$\bar{5}$ 5 $\bar{1}$	$\sqrt{36} : \sqrt{51} : \sqrt{83} = 1 : 1.190 : 1.518$	87° 19'
3 7 8	133	5 $\bar{1}$ $\bar{1}$	$\sqrt{19} : \sqrt{27} : \sqrt{36} = 1 : 1.192 : 1.376$	77° 15'
4 6 7	424	640	$\sqrt{36} : \sqrt{52} : \sqrt{56} = 1 : 1.202 : 1.247$	68° 18'
2 3 10	44 $\bar{2}$	640	$\sqrt{36} : \sqrt{52} : \sqrt{72} = 1 : 1.202 : 1.414$	79° 21'
2 3 19	53 $\bar{1}$	$\bar{1}$ 7 $\bar{1}$	$\sqrt{35} : \sqrt{51} : \sqrt{52} = 1 : 1.207 : 1.219$	66° 16'
7 $\bar{1}$ 0 $\bar{1}$ 5	513	551	$\sqrt{35} : \sqrt{51} : \sqrt{52} = 1 : 1.207 : 1.219$	66° 16'
$\bar{1}$ $\bar{1}$ 0 $\bar{1}$ 7	153	71 $\bar{1}$	$\sqrt{35} : \sqrt{51} : \sqrt{56} = 1 : 1.207 : 1.265$	69° 12'
2 5 19	351	71 $\bar{1}$	$\sqrt{35} : \sqrt{51} : \sqrt{56} = 1 : 1.207 : 1.265$	69° 12'
10 11 13	5 $\bar{1}$ 3	155	$\sqrt{35} : \sqrt{51} : \sqrt{56} = 1 : 1.207 : 1.265$	69° 12'
5 $\bar{1}$ 3 $\bar{1}$ 4	531	$\bar{1}$ 55	$\sqrt{35} : \sqrt{51} : \sqrt{56} = 1 : 1.207 : 1.265$	69° 12'
4 11 17	153	7 $\bar{1}$ $\bar{1}$	$\sqrt{35} : \sqrt{51} : \sqrt{68} = 1 : 1.207 : 1.394$	77° 42'
$\bar{1}$ 3 20	53 $\bar{1}$	551	$\sqrt{35} : \sqrt{51} : \sqrt{68} = 1 : 1.207 : 1.394$	77° 42'
$\bar{1}$ $\bar{1}$ 1 $\bar{1}$ 8	153	7 $\bar{1}$ 1	$\sqrt{35} : \sqrt{51} : \sqrt{84} = 1 : 1.207 : 1.549$	88° 39'
2 7 11	42 $\bar{2}$	$\bar{1}$ 53	$\sqrt{24} : \sqrt{35} : \sqrt{35} = 1 : 1.208 : 1.208$	65° 32'
7 8 9	242	5 $\bar{1}$ 3	$\sqrt{24} : \sqrt{35} : \sqrt{43} = 1 : 1.208 : 1.339$	73° 59'
1 6 13	242	$\bar{5}$ 3 $\bar{1}$	$\sqrt{24} : \sqrt{35} : \sqrt{51} = 1 : 1.208 : 1.458$	82° 04'
5 8 11	242	513	$\sqrt{24} : \sqrt{35} : \sqrt{59} = 1 : 1.208 : 1.568$	90° 00'
4 5 13	42 $\bar{2}$	35 $\bar{1}$	$\sqrt{24} : \sqrt{35} : \sqrt{59} = 1 : 1.208 : 1.568$	90° 00'
3 9 20	620	553	$\sqrt{40} : \sqrt{59} : \sqrt{59} = 1 : 1.214 : 1.214$	65° 41'
6 7 21	06 $\bar{2}$	731	$\sqrt{40} : \sqrt{59} : \sqrt{67} = 1 : 1.214 : 1.294$	70° 46'
7 8 21	60 $\bar{2}$	173	$\sqrt{40} : \sqrt{59} : \sqrt{75} = 1 : 1.214 : 1.369$	75° 42'
3 9 22	620	$\bar{1}$ 73	$\sqrt{40} : \sqrt{59} : \sqrt{83} = 1 : 1.214 : 1.440$	80° 31'
5 15 18	620	355	$\sqrt{40} : \sqrt{59} : \sqrt{83} = 1 : 1.214 : 1.440$	80° 31'
1 3 24	620	37 $\bar{1}$	$\sqrt{40} : \sqrt{59} : \sqrt{91} = 1 : 1.214 : 1.508$	85° 17'
7 10 21	60 $\bar{2}$	$\bar{1}$ 73	$\sqrt{40} : \sqrt{59} : \sqrt{99} = 1 : 1.214 : 1.573$	90° 00'
2 5 15	51 $\bar{1}$	06 $\bar{2}$	$\sqrt{27} : \sqrt{40} : \sqrt{51} = 1 : 1.217 : 1.374$	75° 55'
1 3 16	15 $\bar{1}$	620	$\sqrt{27} : \sqrt{40} : \sqrt{59} = 1 : 1.217 : 1.478$	83° 01'

2. Táblázat (folytatás)

$[u \ v \ w]$	$h_1 \ k_1 \ l_1$	$h_2 \ k_2 \ l_2$	$R_1 : R_2 : R_3$	α
4 3 15	511	062	$\sqrt{27} : \sqrt{40} : \sqrt{59} = 1 : 1.217 : 1.478$	83° 01'
6 9 17	153	640	$\sqrt{35} : \sqrt{52} : \sqrt{59} = 1 : 1.219 : 1.298$	70° 51'
9 10 15	531	064	$\sqrt{35} : \sqrt{52} : \sqrt{59} = 1 : 1.219 : 1.298$	70° 51'
10 11 15	153	604	$\sqrt{35} : \sqrt{52} : \sqrt{75} = 1 : 1.219 : 1.464$	81° 55'
2 3 21	351	640	$\sqrt{35} : \sqrt{52} : \sqrt{83} = 1 : 1.219 : 1.540$	87° 19'
1 4 6	422	442	$\sqrt{24} : \sqrt{36} : \sqrt{52} = 1 : 1.225 : 1.472$	82° 11'
1 4 10	442	462	$\sqrt{36} : \sqrt{56} : \sqrt{68} = 1 : 1.247 : 1.374$	74° 30'
2 7 8	244	642	$\sqrt{36} : \sqrt{56} : \sqrt{68} = 1 : 1.247 : 1.374$	74° 30'
5 6 8	424	462	$\sqrt{36} : \sqrt{56} : \sqrt{84} = 1 : 1.247 : 1.528$	84° 53'
1 9 14	511	353	$\sqrt{27} : \sqrt{43} : \sqrt{56} = 1 : 1.262 : 1.440$	78° 09'
7 11 16	153	624	$\sqrt{35} : \sqrt{56} : \sqrt{59} = 1 : 1.265 : 1.298$	68° 49'
1 8 19	531	642	$\sqrt{35} : \sqrt{56} : \sqrt{59} = 1 : 1.265 : 1.298$	68° 49'
3 11 18	531	264	$\sqrt{35} : \sqrt{56} : \sqrt{67} = 1 : 1.265 : 1.384$	74° 16'
8 11 17	513	462	$\sqrt{35} : \sqrt{56} : \sqrt{75} = 1 : 1.265 : 1.464$	79° 35'
7 13 16	513	264	$\sqrt{35} : \sqrt{56} : \sqrt{75} = 1 : 1.265 : 1.464$	79° 35'
11 13 14	513	264	$\sqrt{35} : \sqrt{56} : \sqrt{83} = 1 : 1.265 : 1.540$	84° 49'
5 13 16	442	713	$\sqrt{36} : \sqrt{59} : \sqrt{59} = 1 : 1.280 : 1.280$	67° 01'
1 9 20	442	731	$\sqrt{36} : \sqrt{59} : \sqrt{67} = 1 : 1.280 : 1.364$	72° 19'
8 13 17	244	731	$\sqrt{36} : \sqrt{59} : \sqrt{83} = 1 : 1.280 : 1.518$	82° 31'
1 11 20	442	553	$\sqrt{36} : \sqrt{59} : \sqrt{83} = 1 : 1.280 : 1.518$	82° 31'
4 15 17	244	731	$\sqrt{36} : \sqrt{59} : \sqrt{91} = 1 : 1.280 : 1.590$	87° 31'
7 15 16	442	555	$\sqrt{36} : \sqrt{59} : \sqrt{91} = 1 : 1.280 : 1.590$	87° 31'
1 3 7	242	620	$\sqrt{24} : \sqrt{40} : \sqrt{56} = 1 : 1.291 : 1.528$	82° 35'
7 8 19	351	713	$\sqrt{35} : \sqrt{59} : \sqrt{68} = 1 : 1.298 : 1.394$	73° 23'
5 7 20	351	553	$\sqrt{35} : \sqrt{59} : \sqrt{68} = 1 : 1.298 : 1.394$	73° 23'
2 11 19	153	731	$\sqrt{35} : \sqrt{59} : \sqrt{72} = 1 : 1.298 : 1.434$	75° 59'
7 10 19	153	731	$\sqrt{35} : \sqrt{59} : \sqrt{84} = 1 : 1.298 : 1.549$	83° 41'
1 5 22	351	731	$\sqrt{35} : \sqrt{59} : \sqrt{84} = 1 : 1.298 : 1.549$	83° 41'
5 14 17	531	355	$\sqrt{35} : \sqrt{59} : \sqrt{84} = 1 : 1.298 : 1.549$	83° 41'
10 11 17	531	355	$\sqrt{35} : \sqrt{59} : \sqrt{84} = 1 : 1.298 : 1.549$	83° 41'
9 12 17	153	713	$\sqrt{35} : \sqrt{59} : \sqrt{88} = 1 : 1.298 : 1.586$	86° 13'
1 3 6	311	331	$\sqrt{11} : \sqrt{19} : \sqrt{20} = 1 : 1.314 : 1.348$	69° 46'
3 4 5	311	133	$\sqrt{11} : \sqrt{19} : \sqrt{24} = 1 : 1.314 : 1.477$	78° 01'
3 6 11	420	153	$\sqrt{20} : \sqrt{35} : \sqrt{43} = 1 : 1.323 : 1.466$	76° 54'
1 2 13	420	351	$\sqrt{20} : \sqrt{35} : \sqrt{51} = 1 : 1.323 : 1.597$	85° 40'
5 7 10	402	153	$\sqrt{20} : \sqrt{35} : \sqrt{51} = 1 : 1.323 : 1.597$	85° 40'
3 8 13	242	553	$\sqrt{24} : \sqrt{43} : \sqrt{51} = 1 : 1.339 : 1.458$	75° 35'

2. Táblázat (folytatás)

$[u\ v\ w]$	$h_1\ k_1\ l_1$	$h_2\ k_2\ l_2$	$R_1 : R_2 : R_3$	α
2 9 13	42 $\bar{2}$	35 $\bar{3}$	$\sqrt{24} : \sqrt{43} : \sqrt{59} = 1 : 1.339 : 1.568$	82° 51'
1 2 6	4 $\bar{2}0$	44 $\bar{2}$	$\sqrt{20} : \sqrt{36} : \sqrt{40} = 1 : 1.342 : 1.414$	72° 39'
2 4 5	4 $\bar{2}0$	24 $\bar{4}$	$\sqrt{20} : \sqrt{36} : \sqrt{56} = 1 : 1.342 : 1.673$	90° 00'
1 2 7	13 $\bar{1}$	4 $\bar{2}0$	$\sqrt{11} : \sqrt{20} : \sqrt{27} = 1 : 1.348 : 1.567$	82° 15'
4 7 9	33 $\bar{1}$	51 $\bar{3}$	$\sqrt{19} : \sqrt{35} : \sqrt{36} = 1 : 1.357 : 1.376$	69° 34'
1 3 12	33 $\bar{1}$	35 $\bar{1}$	$\sqrt{19} : \sqrt{35} : \sqrt{40} = 1 : 1.357 : 1.451$	74° 15'
3 8 9	13 $\bar{3}$	53 $\bar{1}$	$\sqrt{19} : \sqrt{35} : \sqrt{40} = 1 : 1.357 : 1.451$	74° 15'
6 7 9	13 $\bar{3}$	53 $\bar{1}$	$\sqrt{19} : \sqrt{35} : \sqrt{52} = 1 : 1.357 : 1.654$	87° 47'
2 3 17	15 $\bar{1}$	71 $\bar{1}$	$\sqrt{27} : \sqrt{51} : \sqrt{52} = 1 : 1.374 : 1.388$	69° 30'
3 4 17	15 $\bar{1}$	71 $\bar{1}$	$\sqrt{27} : \sqrt{51} : \sqrt{56} = 1 : 1.374 : 1.440$	72° 45'
5 12 13	51 $\bar{1}$	15 $\bar{3}$	$\sqrt{27} : \sqrt{51} : \sqrt{68} = 1 : 1.374 : 1.587$	82° 15'
1 3 12	33 $\bar{1}$	44 $\bar{2}$	$\sqrt{19} : \sqrt{36} : \sqrt{51} = 1 : 1.376 : 1.638$	85° 37'
5 8 9	33 $\bar{1}$	42 $\bar{4}$	$\sqrt{19} : \sqrt{36} : \sqrt{51} = 1 : 1.376 : 1.638$	85° 37'
1 10 15	51 $\bar{1}$	06 $\bar{4}$	$\sqrt{27} : \sqrt{52} : \sqrt{59} = 1 : 1.388 : 1.478$	74° 31'
2 3 6	04 $\bar{2}$	60 $\bar{2}$	$\sqrt{20} : \sqrt{40} : \sqrt{52} = 1 : 1.414 : 1.612$	81° 52'
2 7 17	51 $\bar{1}$	46 $\bar{2}$	$\sqrt{27} : \sqrt{56} : \sqrt{59} = 1 : 1.440 : 1.478$	72° 01'
3 11 14	51 $\bar{1}$	26 $\bar{4}$	$\sqrt{27} : \sqrt{56} : \sqrt{59} = 1 : 1.440 : 1.478$	72° 01'
5 9 16	51 $\bar{1}$	26 $\bar{4}$	$\sqrt{27} : \sqrt{56} : \sqrt{67} = 1 : 1.440 : 1.575$	78° 08'
1 11 16	51 $\bar{1}$	26 $\bar{4}$	$\sqrt{27} : \sqrt{56} : \sqrt{83} = 1 : 1.440 : 1.753$	90° 00'
3 9 10	13 $\bar{3}$	62 $\bar{0}$	$\sqrt{19} : \sqrt{40} : \sqrt{59} = 1 : 1.451 : 1.762$	90° 00'
1 8 15	24 $\bar{2}$	71 $\bar{1}$	$\sqrt{24} : \sqrt{51} : \sqrt{59} = 1 : 1.458 : 1.568$	76° 47'
4 7 15	42 $\bar{2}$	55 $\bar{1}$	$\sqrt{24} : \sqrt{51} : \sqrt{59} = 1 : 1.458 : 1.568$	76° 47'
9 10 11	24 $\bar{2}$	51 $\bar{5}$	$\sqrt{24} : \sqrt{51} : \sqrt{67} = 1 : 1.458 : 1.671$	83° 26'
3 9 10	40 $\bar{2}$	35 $\bar{3}$	$\sqrt{20} : \sqrt{43} : \sqrt{51} = 1 : 1.466 : 1.597$	78° 12'
3 6 13	42 $\bar{0}$	35 $\bar{3}$	$\sqrt{20} : \sqrt{43} : \sqrt{59} = 1 : 1.466 : 1.718$	86° 05'
2 3 8	24 $\bar{2}$	64 $\bar{0}$	$\sqrt{24} : \sqrt{52} : \sqrt{68} = 1 : 1.472 : 1.683$	83° 30'
4 5 6	24 $\bar{2}$	60 $\bar{4}$	$\sqrt{24} : \sqrt{52} : \sqrt{68} = 1 : 1.472 : 1.683$	83° 30'
2 3 7	13 $\bar{1}$	42 $\bar{2}$	$\sqrt{11} : \sqrt{24} : \sqrt{27} = 1 : 1.477 : 1.567$	75° 45'
1 4 7	31 $\bar{1}$	24 $\bar{2}$	$\sqrt{11} : \sqrt{24} : \sqrt{35} = 1 : 1.477 : 1.784$	90° 00'
1 4 19	15 $\bar{1}$	73 $\bar{1}$	$\sqrt{27} : \sqrt{59} : \sqrt{68} = 1 : 1.478 : 1.587$	76° 58'
3 8 17	51 $\bar{1}$	17 $\bar{3}$	$\sqrt{27} : \sqrt{59} : \sqrt{68} = 1 : 1.478 : 1.587$	76° 58'
3 4 19	51 $\bar{1}$	37 $\bar{1}$	$\sqrt{27} : \sqrt{59} : \sqrt{72} = 1 : 1.478 : 1.633$	79° 54'
5 7 18	51 $\bar{1}$	17 $\bar{3}$	$\sqrt{27} : \sqrt{59} : \sqrt{84} = 1 : 1.478 : 1.764$	88° 34'
3 7 12	33 $\bar{1}$	53 $\bar{3}$	$\sqrt{19} : \sqrt{43} : \sqrt{56} = 1 : 1.504 : 1.717$	83° 59'
1 3 7	42 $\bar{2}$	26 $\bar{4}$	$\sqrt{24} : \sqrt{56} : \sqrt{56} = 1 : 1.528 : 1.528$	70° 54'
3 3 7	24 $\bar{2}$	62 $\bar{4}$	$\sqrt{24} : \sqrt{56} : \sqrt{72} = 1 : 1.528 : 1.732$	83° 44'
3 3 4	22 $\bar{0}$	31 $\bar{3}$	$\sqrt{8} : \sqrt{19} : \sqrt{19} = 1 : 1.541 : 1.541$	71° 04'

2. Táblázat (folytatás)

$[u \ v \ w]$	$h_1 \ k_1 \ l_1$	$h_2 \ k_2 \ l_2$	$R_1 : R_2 : R_3$	α
1 1 6	220	331	$\sqrt{8} : \sqrt{19} : \sqrt{27} = 1 : 1.541 : 1.837$	90° 00'
1 3 8	131	511	$\sqrt{11} : \sqrt{27} : \sqrt{36} = 1 : 1.567 : 1.809$	86° 40'
7 10 13	242	713	$\sqrt{24} : \sqrt{59} : \sqrt{59} = 1 : 1.568 : 1.568$	71° 24'
5 6 17	242	731	$\sqrt{24} : \sqrt{59} : \sqrt{75} = 1 : 1.568 : 1.768$	83° 54'
2 11 15	422	553	$\sqrt{24} : \sqrt{59} : \sqrt{75} = 1 : 1.568 : 1.768$	83° 54'
1 8 17	242	731	$\sqrt{24} : \sqrt{59} : \sqrt{83} = 1 : 1.568 : 1.860$	90° 00'
1 2 2	022	420	$\sqrt{8} : \sqrt{20} : \sqrt{20} = 1 : 1.581 : 1.581$	71° 34'
1 2 15	420	551	$\sqrt{20} : \sqrt{51} : \sqrt{51} = 1 : 1.597 : 1.597$	71° 45'
1 7 14	042	711	$\sqrt{20} : \sqrt{51} : \sqrt{59} = 1 : 1.597 : 1.718$	79° 10'
5 10 11	420	155	$\sqrt{20} : \sqrt{51} : \sqrt{59} = 1 : 1.597 : 1.718$	79° 10'
3 7 14	042	711	$\sqrt{20} : \sqrt{51} : \sqrt{67} = 1 : 1.597 : 1.830$	86° 25'
3 4 6	402	064	$\sqrt{20} : \sqrt{52} : \sqrt{56} = 1 : 1.612 : 1.673$	75° 38'
1 1 2	111	220	$\sqrt{3} : \sqrt{8} : \sqrt{11} = 1 : 1.633 : 1.915$	90° 00'
3 10 11	133	711	$\sqrt{19} : \sqrt{51} : \sqrt{56} = 1 : 1.638 : 1.717$	77° 00'
7 9 10	313	551	$\sqrt{19} : \sqrt{51} : \sqrt{56} = 1 : 1.638 : 1.717$	77° 00'
1 4 15	331	551	$\sqrt{19} : \sqrt{51} : \sqrt{68} = 1 : 1.638 : 1.892$	88° 10'
2 3 15	331	640	$\sqrt{19} : \sqrt{52} : \sqrt{59} = 1 : 1.654 : 1.762$	79° 00'
6 9 11	133	640	$\sqrt{19} : \sqrt{52} : \sqrt{59} = 1 : 1.654 : 1.762$	79° 00'
0 1 3	200	131	$\sqrt{4} : \sqrt{11} : \sqrt{11} = 1 : 1.658 : 1.658$	72° 27'
1 2 8	420	462	$\sqrt{20} : \sqrt{56} : \sqrt{68} = 1 : 1.673 : 1.844$	83° 08'
2 4 7	420	264	$\sqrt{20} : \sqrt{56} : \sqrt{68} = 1 : 1.673 : 1.844$	83° 08'
5 9 12	331	624	$\sqrt{19} : \sqrt{56} : \sqrt{59} = 1 : 1.717 : 1.762$	75° 48'
1 6 15	331	642	$\sqrt{19} : \sqrt{56} : \sqrt{67} = 1 : 1.717 : 1.878$	82° 57'
8 9 11	313	462	$\sqrt{19} : \sqrt{56} : \sqrt{75} = 1 : 1.717 : 1.987$	90° 00'
5 7 14	042	731	$\sqrt{20} : \sqrt{59} : \sqrt{59} = 1 : 1.718 : 1.718$	73° 05'
1 2 17	420	371	$\sqrt{20} : \sqrt{59} : \sqrt{75} = 1 : 1.718 : 1.936$	86° 40'
5 10 13	420	353	$\sqrt{20} : \sqrt{59} : \sqrt{75} = 1 : 1.718 : 1.936$	86° 40'
1 1 3	220	422	$\sqrt{8} : \sqrt{24} : \sqrt{24} = 1 : 1.732 : 1.732$	73° 13'
3 11 12	133	731	$\sqrt{19} : \sqrt{59} : \sqrt{68} = 1 : 1.762 : 1.892$	81° 25'
2 7 15	331	553	$\sqrt{19} : \sqrt{59} : \sqrt{72} = 1 : 1.762 : 1.947$	84° 52'
1 5 8	311	153	$\sqrt{11} : \sqrt{35} : \sqrt{36} = 1 : 1.784 : 1.809$	75° 14'
4 5 7	311	153	$\sqrt{11} : \sqrt{35} : \sqrt{36} = 1 : 1.784 : 1.809$	75° 14'
2 3 9	311	351	$\sqrt{11} : \sqrt{35} : \sqrt{40} = 1 : 1.784 : 1.907$	81° 12'
2 5 5	022	511	$\sqrt{8} : \sqrt{27} : \sqrt{35} = 1 : 1.837 : 2.092$	90° 00'
3 4 9	131	602	$\sqrt{11} : \sqrt{40} : \sqrt{43} = 1 : 1.907 : 1.977$	79° 00'
1 3 10	131	620	$\sqrt{11} : \sqrt{40} : \sqrt{51} = 1 : 1.907 : 2.153$	90° 00'
1 6 9	311	353	$\sqrt{11} : \sqrt{43} : \sqrt{52} = 1 : 1.977 : 2.174$	87° 22'

2. Táblázat (folytatás)

$[u \ v \ w]$	$h_1 \ k_1 \ l_1$	$h_2 \ k_2 \ l_2$	$R_1 : R_2 : R_3$	α
1 1 8	220	53 $\bar{1}$	$\sqrt{8} : \sqrt{35} : \sqrt{35} = 1 : 2.092 : 2.092$	76° 10'
4 5 5	02 $\bar{2}$	331	$\sqrt{8} : \sqrt{35} : \sqrt{35} = 1 : 2.092 : 2.092$	76° 10'
2 2 3	220	42 $\bar{4}$	$\sqrt{8} : \sqrt{36} : \sqrt{36} = 1 : 2.121 : 2.121$	76° 22'
2 3 $\bar{1}\bar{1}$	13 $\bar{1}$	7 $\bar{1}\bar{1}$	$\sqrt{11} : \sqrt{51} : \sqrt{52} = 1 : 2.153 : 2.174$	77° 49'
1 4 11	13 $\bar{1}$	71 $\bar{1}$	$\sqrt{11} : \sqrt{51} : \sqrt{56} = 1 : 2.153 : 2.256$	82° 43'
5 7 8	3 $\bar{1}\bar{1}$	15 $\bar{3}$	$\sqrt{11} : \sqrt{51} : \sqrt{56} = 1 : 2.153 : 2.256$	82° 43'
3 6 9	3 $\bar{1}\bar{1}$	064	$\sqrt{11} : \sqrt{52} : \sqrt{59} = 1 : 2.174 : 2.316$	85° 12'
1 3 3	02 $\bar{2}$	620	$\sqrt{8} : \sqrt{40} : \sqrt{40} = 1 : 2.236 : 2.236$	77° 05'
0 1 2	200	04 $\bar{2}$	$\sqrt{4} : \sqrt{20} : \sqrt{24} = 1 : 2.236 : 2.449$	90° 00'
2 3 $\bar{1}\bar{1}$	31 $\bar{1}$	462	$\sqrt{11} : \sqrt{56} : \sqrt{59} = 1 : 2.256 : 2.316$	80° 44'
1 7 10	31 $\bar{1}$	264	$\sqrt{11} : \sqrt{56} : \sqrt{59} = 1 : 2.256 : 2.316$	80° 44'
4 5 11	13 $\bar{1}$	71 $\bar{3}$	$\sqrt{11} : \sqrt{59} : \sqrt{68} = 1 : 2.316 : 2.486$	87° 45'
3 3 8	220	53 $\bar{3}$	$\sqrt{8} : \sqrt{43} : \sqrt{43} = 1 : 2.318 : 2.318$	77° 33'
5 5 6	220	33 $\bar{3}$	$\sqrt{8} : \sqrt{43} : \sqrt{51} = 1 : 2.318 : 2.525$	90° 00'
1 2 3	11 $\bar{1}$	33 $\bar{1}$	$\sqrt{3} : \sqrt{19} : \sqrt{20} = 1 : 2.517 : 2.582$	82° 23'
2 7 7	02 $\bar{2}$	711	$\sqrt{8} : \sqrt{51} : \sqrt{59} = 1 : 2.525 : 2.716$	90° 00'
1 1 10	220	55 $\bar{1}$	$\sqrt{8} : \sqrt{51} : \sqrt{59} = 1 : 2.525 : 2.716$	90° 00'
0 1 5	200	15 $\bar{1}$	$\sqrt{4} : \sqrt{27} : \sqrt{27} = 1 : 2.598 : 2.598$	78° 54'
1 1 5	220	64 $\bar{2}$	$\sqrt{8} : \sqrt{56} : \sqrt{56} = 1 : 2.646 : 2.646$	79° 06'
4 7 7	02 $\bar{2}$	731	$\sqrt{8} : \sqrt{59} : \sqrt{59} = 1 : 2.716 : 2.716$	79° 23'
5 5 8	220	53 $\bar{3}$	$\sqrt{8} : \sqrt{59} : \sqrt{59} = 1 : 2.716 : 2.716$	79° 23'
3 3 10	220	55 $\bar{3}$	$\sqrt{8} : \sqrt{59} : \sqrt{67} = 1 : 2.716 : 2.894$	90° 00'
0 3 5	200	15 $\bar{3}$	$\sqrt{4} : \sqrt{35} : \sqrt{35} = 1 : 2.958 : 2.958$	80° 16'
1 3 4	11 $\bar{1}$	531	$\sqrt{3} : \sqrt{35} : \sqrt{36} = 1 : 3.416 : 3.464$	84° 24'
0 1 7	200	17 $\bar{1}$	$\sqrt{4} : \sqrt{51} : \sqrt{51} = 1 : 3.571 : 3.571$	81° 57'
0 2 3	200	064	$\sqrt{4} : \sqrt{52} : \sqrt{56} = 1 : 3.606 : 3.742$	90° 00'
0 3 7	200	17 $\bar{3}$	$\sqrt{4} : \sqrt{59} : \sqrt{59} = 1 : 3.841 : 3.841$	82° 31'
2 3 5	11 $\bar{1}$	35 $\bar{1}$	$\sqrt{3} : \sqrt{51} : \sqrt{52} = 1 : 4.123 : 4.163$	85° 22'
1 4 5	11 $\bar{1}$	64 $\bar{2}$	$\sqrt{3} : \sqrt{56} : \sqrt{59} = 1 : 4.320 : 4.435$	90° 00'

3. TÁBLÁZAT
Gyémánt rács

$[u\ v\ w]$	$h_1\ k_1\ l_1$	$h_2\ k_2\ l_2$	$R_1 : R_2 : R_3$	α
1 1 1	220	202	$\sqrt{8} : \sqrt{8} : \sqrt{8} = 1 : 1 : 1$	60° 00'
* 7 8 11	153	531	$\sqrt{35} : \sqrt{35} : \sqrt{36} = 1 : 1 : 1.014$	60° 56'
* 3 5 6	133	331	$\sqrt{19} : \sqrt{19} : \sqrt{20} = 1 : 1 : 1.026$	61° 44'
* 8 11 23	173	731	$\sqrt{59} : \sqrt{59} : \sqrt{68} = 1 : 1 : 1.074$	64° 56'
* 7 8 25	731	553	$\sqrt{59} : \sqrt{59} : \sqrt{72} = 1 : 1 : 1.105$	67° 03'
1 7 11	264	642	$\sqrt{56} : \sqrt{56} : \sqrt{72} = 1 : 1 : 1.134$	69° 05'
* 0 1 1	111	111	$\sqrt{3} : \sqrt{3} : \sqrt{4} = 1 : 1 : 1.155$	70° 32'
1 3 9	062	620	$\sqrt{40} : \sqrt{40} : \sqrt{56} = 1 : 1 : 1.183$	72° 33'
2 4 5	624	264	$\sqrt{56} : \sqrt{56} : \sqrt{80} = 1 : 1 : 1.195$	73° 24'
* 6 9 13	513	153	$\sqrt{35} : \sqrt{35} : \sqrt{52} = 1 : 1 : 1.219$	75° 06'
* 3 12 17	533	353	$\sqrt{43} : \sqrt{43} : \sqrt{68} = 1 : 1 : 1.258$	77° 55'
1 3 5	422	242	$\sqrt{24} : \sqrt{24} : \sqrt{40} = 1 : 1 : 1.291$	80° 24'
* 5 17 18	711	155	$\sqrt{51} : \sqrt{51} : \sqrt{88} = 1 : 1 : 1.314$	82° 07'
* 1 2 5	311	131	$\sqrt{11} : \sqrt{11} : \sqrt{20} = 1 : 1 : 1.348$	84° 47'
* 2 3 13	511	151	$\sqrt{27} : \sqrt{27} : \sqrt{52} = 1 : 1 : 1.388$	87° 53'
* 1 4 17	531	351	$\sqrt{35} : \sqrt{35} : \sqrt{68} = 1 : 1 : 1.394$	88° 22'
* 3 4 25	711	171	$\sqrt{51} : \sqrt{51} : \sqrt{100} = 1 : 1 : 1.400$	88° 53'
0 0 1	220	220	$\sqrt{8} : \sqrt{8} : \sqrt{16} = 1 : 1 : 1.414$	90° 00'
* 3 11 12	513	442	$\sqrt{35} : \sqrt{36} : \sqrt{51} = 1 : 1.014 : 1.207$	73° 38'
* 3 3 16	351	442	$\sqrt{35} : \sqrt{36} : \sqrt{51} = 1 : 1.014 : 1.207$	73° 38'
* 4 11 13	531	244	$\sqrt{35} : \sqrt{36} : \sqrt{59} = 1 : 1.014 : 1.298$	80° 16'
* 1 7 16	531	442	$\sqrt{35} : \sqrt{36} : \sqrt{59} = 1 : 1.014 : 1.298$	80° 16'
* 8 9 13	531	244	$\sqrt{35} : \sqrt{36} : \sqrt{67} = 1 : 1.014 : 1.384$	86° 46'
* 1 2 9	331	420	$\sqrt{19} : \sqrt{20} : \sqrt{27} = 1 : 1.026 : 1.192$	72° 04'
* 3 6 7	133	420	$\sqrt{19} : \sqrt{20} : \sqrt{35} = 1 : 1.026 : 1.357$	84° 07'
* 3 12 15	602	353	$\sqrt{40} : \sqrt{43} : \sqrt{59} = 1 : 1.037 : 1.214$	73° 11'
* 3 4 11	242	511	$\sqrt{24} : \sqrt{27} : \sqrt{35} = 1 : 1.061 : 1.208$	71° 41'
* 1 6 11	242	511	$\sqrt{24} : \sqrt{27} : \sqrt{43} = 1 : 1.061 : 1.339$	80° 58'
* 3 9 14	153	620	$\sqrt{35} : \sqrt{40} : \sqrt{43} = 1 : 1.069 : 1.108$	64° 41'
* 5 6 15	351	602	$\sqrt{35} : \sqrt{40} : \sqrt{43} = 1 : 1.069 : 1.108$	64° 41'
* 3 8 15	153	602	$\sqrt{35} : \sqrt{40} : \sqrt{51} = 1 : 1.069 : 1.207$	71° 18'
* 1 3 18	351	620	$\sqrt{35} : \sqrt{40} : \sqrt{59} = 1 : 1.069 : 1.298$	77° 39'
* 3 9 16	153	620	$\sqrt{35} : \sqrt{40} : \sqrt{67} = 1 : 1.069 : 1.384$	83° 52'
* 4 9 19	353	711	$\sqrt{43} : \sqrt{51} : \sqrt{56} = 1 : 1.089 : 1.141$	66° 04'
* 1 12 19	353	711	$\sqrt{43} : \sqrt{51} : \sqrt{68} = 1 : 1.089 : 1.258$	73° 53'
* 5 9 20	353	351	$\sqrt{43} : \sqrt{51} : \sqrt{68} = 1 : 1.089 : 1.258$	73° 53'

3. Táblázat (folytatás)

$[u\ v\ w]$	$h_1\ k_1\ l_1$	$h_2\ k_2\ l_2$	$R_1 : R_2 : R_3$	α
* 11 14 15	33 $\bar{5}$	35 $\bar{1}$	$\sqrt{43} : \sqrt{51} : \sqrt{84} = 1 : 1.089 : 1.398$	83° 52'
* $\bar{1}$ 9 $\bar{16}$	44 $\bar{2}$	353	$\sqrt{36} : \sqrt{43} : \sqrt{51} = 1 : 1.093$	69° 09'
* 7 12 13	42 $\bar{4}$	35 $\bar{3}$	$\sqrt{36} : \sqrt{43} : \sqrt{59} = 1 : 1.093 : 1.280$	75° 17'
* 3 11 16	44 $\bar{2}$	53 $\bar{3}$	$\sqrt{36} : \sqrt{43} : \sqrt{75} = 1 : 1.093 : 1.443$	87° 05'
* $\bar{6}$ 9 $\bar{19}$	53 $\bar{3}$	640	$\sqrt{43} : \sqrt{52} : \sqrt{59} = 1 : 1.100 : 1.171$	67° 38'
* 3 10 15	53 $\bar{1}$	53 $\bar{3}$	$\sqrt{35} : \sqrt{43} : \sqrt{52} = 1 : 1.108 : 1.219$	70° 25'
* 9 11 12	53 $\bar{1}$	335	$\sqrt{35} : \sqrt{43} : \sqrt{56} = 1 : 1.108 : 1.265$	73° 32'
* $\bar{2}$ 9 $\bar{17}$	53 $\bar{1}$	353	$\sqrt{35} : \sqrt{43} : \sqrt{72} = 1 : 1.108 : 1.434$	85° 34'
* $\bar{6}$ 7 $\bar{17}$	35 $\bar{1}$	533	$\sqrt{35} : \sqrt{43} : \sqrt{72} = 1 : 1.108 : 1.434$	85° 34'
* $\bar{1}$ 4 9	33 $\bar{1}$	242	$\sqrt{19} : \sqrt{24} : \sqrt{27} = 1 : 1.124 : 1.192$	68° 00'
* 2 5 9	33 $\bar{1}$	42 $\bar{2}$	$\sqrt{19} : \sqrt{24} : \sqrt{35} = 1 : 1.124 : 1.357$	79° 12'
* 5 6 7	31 $\bar{3}$	242	$\sqrt{19} : \sqrt{24} : \sqrt{35} = 1 : 1.124 : 1.357$	79° 12'
* 1 3 20	620	55 $\bar{1}$	$\sqrt{40} : \sqrt{51} : \sqrt{51} = 1 : 1.129 : 1.129$	63° 43'
* 5 14 15	60 $\bar{2}$	153	$\sqrt{40} : \sqrt{51} : \sqrt{59} = 1 : 1.129 : 1.214$	69° 15'
* $\bar{1}$ 3 22	620	171	$\sqrt{40} : \sqrt{51} : \sqrt{75} = 1 : 1.129 : 1.369$	79° 48'
* $\bar{2}$ 7 21	06 $\bar{2}$	71 $\bar{1}$	$\sqrt{40} : \sqrt{51} : \sqrt{75} = 1 : 1.129 : 1.369$	79° 48'
* 4 7 21	06 $\bar{2}$	711	$\sqrt{40} : \sqrt{51} : \sqrt{83} = 1 : 1.129 : 1.440$	84° 55'
* 5 15 16	620	155	$\sqrt{40} : \sqrt{51} : \sqrt{83} = 1 : 1.129 : 1.440$	84° 55'
* 1 7 12	51 $\bar{1}$	153	$\sqrt{27} : \sqrt{35} : \sqrt{36} = 1 : 1.139 : 1.155$	64° 59'
* $\bar{1}$ 3 14	15 $\bar{1}$	531	$\sqrt{27} : \sqrt{35} : \sqrt{40} = 1 : 1.139 : 1.217$	69° 02'
* 1 8 13	51 $\bar{1}$	153	$\sqrt{27} : \sqrt{35} : \sqrt{56} = 1 : 1.139 : 1.440$	84° 24'
* 4 7 13	51 $\bar{1}$	153	$\sqrt{27} : \sqrt{35} : \sqrt{56} = 1 : 1.139 : 1.440$	84° 24'
* 3 13 18	53 $\bar{3}$	264	$\sqrt{43} : \sqrt{56} : \sqrt{59} = 1 : 1.141 : 1.171$	65° 57'
* 12 13 15	335	462	$\sqrt{43} : \sqrt{56} : \sqrt{67} = 1 : 1.141 : 1.248$	70° 58'
* 3 14 19	53 $\bar{3}$	642	$\sqrt{43} : \sqrt{56} : \sqrt{75} = 1 : 1.141 : 1.321$	75° 51'
* 1 12 21	353	642	$\sqrt{43} : \sqrt{56} : \sqrt{83} = 1 : 1.141 : 1.389$	80° 37'
* 6 11 21	533	462	$\sqrt{43} : \sqrt{56} : \sqrt{91} = 1 : 1.141 : 1.455$	85° 19'
* 7 15 18	353	624	$\sqrt{43} : \sqrt{56} : \sqrt{91} = 1 : 1.141 : 1.455$	85° 19'
* 4 9 11	51 $\bar{1}$	244	$\sqrt{27} : \sqrt{36} : \sqrt{43} = 1 : 1.155 : 1.262$	71° 18'
* $\bar{1}$ 2 11	420	151	$\sqrt{20} : \sqrt{27} : \sqrt{35} = 1 : 1.162 : 1.323$	75° 02'
* $\bar{1}$ 5 10	042	51 $\bar{1}$	$\sqrt{20} : \sqrt{27} : \sqrt{35} = 1 : 1.162 : 1.323$	75° 02'
* 3 5 10	042	511	$\sqrt{20} : \sqrt{27} : \sqrt{43} = 1 : 1.162 : 1.466$	85° 04'
* 9 15 16	353	713	$\sqrt{43} : \sqrt{59} : \sqrt{68} = 1 : 2.171 : 1.258$	70° 16'
* 8 15 17	353	535	$\sqrt{43} : \sqrt{59} : \sqrt{72} = 1 : 1.171 : 3.294$	72° 40'
* 1 1 4	220	31 $\bar{1}$	$\sqrt{8} : \sqrt{11} : \sqrt{11} = 1 : 1.173 : 1.173$	64° 46'
* 2 3 3	022	31 $\bar{1}$	$\sqrt{8} : \sqrt{11} : \sqrt{19} = 1 : 1.173 : 1.541$	90° 00'
3 5 9	602	264	$\sqrt{40} : \sqrt{56} : \sqrt{56} = 1 : 1.183 : 1.183$	65° 00'

3. Táblázat (folytatás)

$[u v w]$	$h_1 k_1 l_1$	$h_2 k_2 l_2$	$R_1 : R_2 : R_3$	α
1 3 11	620	462	$\sqrt{40} : \sqrt{56} : \sqrt{72} = 1 : 1.183 : 1.342$	75° 19'
3 7 9	602	264	$\sqrt{40} : \sqrt{56} : \sqrt{88} = 1 : 1.183 : 1.483$	85° 09'
* 4 13 15	244	711	$\sqrt{36} : \sqrt{51} : \sqrt{59} = 1 : 1.190 : 1.280$	70° 56'
* 8 11 15	244	351	$\sqrt{36} : \sqrt{51} : \sqrt{59} = 1 : 1.190 : 1.280$	70° 56'
* 3 7 20	442	351	$\sqrt{36} : \sqrt{51} : \sqrt{83} = 1 : 1.190 : 1.518$	87° 19'
* 3 7 8	133	511	$\sqrt{19} : \sqrt{27} : \sqrt{36} = 1 : 1.192 : 1.376$	77° 15'
* 2 3 19	531	171	$\sqrt{35} : \sqrt{51} : \sqrt{52} = 1 : 1.207 : 1.219$	66° 16'
* 7 10 15	513	551	$\sqrt{35} : \sqrt{51} : \sqrt{52} = 1 : 1.207 : 1.219$	66° 16'
* 1 10 17	153	711	$\sqrt{35} : \sqrt{51} : \sqrt{56} = 1 : 1.207 : 1.265$	69° 12'
* 2 5 19	331	711	$\sqrt{35} : \sqrt{51} : \sqrt{56} = 1 : 1.207 : 1.265$	69° 12'
* 10 11 13	513	155	$\sqrt{35} : \sqrt{51} : \sqrt{56} = 1 : 1.207 : 1.265$	69° 12'
* 3 13 14	531	155	$\sqrt{35} : \sqrt{51} : \sqrt{56} = 1 : 1.207 : 1.265$	69° 12'
* 4 11 17	153	711	$\sqrt{35} : \sqrt{51} : \sqrt{68} = 1 : 1.207 : 1.394$	77° 42'
* 1 3 20	531	551	$\sqrt{35} : \sqrt{51} : \sqrt{68} = 1 : 1.207 : 1.394$	77° 42'
* 1 11 18	153	711	$\sqrt{35} : \sqrt{51} : \sqrt{84} = 1 : 1.207 : 1.549$	88° 39'
* 2 7 11	422	153	$\sqrt{24} : \sqrt{35} : \sqrt{35} = 1 : 1.208 : 1.208$	65° 32'
* 7 8 9	242	513	$\sqrt{24} : \sqrt{35} : \sqrt{43} = 1 : 1.208 : 1.339$	73° 59'
* 1 6 13	242	331	$\sqrt{24} : \sqrt{35} : \sqrt{51} = 1 : 1.208 : 1.458$	82° 04'
* 5 8 11	242	513	$\sqrt{24} : \sqrt{35} : \sqrt{59} = 1 : 1.208 : 1.568$	90° 00'
* 4 5 13	422	351	$\sqrt{24} : \sqrt{35} : \sqrt{59} = 1 : 1.208 : 1.568$	90° 00'
* 3 9 20	620	553	$\sqrt{40} : \sqrt{59} : \sqrt{59} = 1 : 1.214 : 1.214$	65° 41'
* 6 7 21	062	731	$\sqrt{40} : \sqrt{59} : \sqrt{67} = 1 : 1.214 : 1.294$	70° 46'
* 7 8 21	602	173	$\sqrt{40} : \sqrt{59} : \sqrt{75} = 1 : 1.214 : 1.369$	75° 42'
* 3 9 22	620	173	$\sqrt{40} : \sqrt{59} : \sqrt{83} = 1 : 1.214 : 1.440$	80° 31'
* 5 15 18	620	355	$\sqrt{40} : \sqrt{59} : \sqrt{83} = 1 : 1.214 : 1.440$	80° 31'
* 1 3 24	620	371	$\sqrt{40} : \sqrt{59} : \sqrt{91} = 1 : 1.214 : 1.508$	85° 17'
* 7 10 21	602	173	$\sqrt{40} : \sqrt{59} : \sqrt{99} = 1 : 1.214 : 1.573$	90° 00'
* 2 5 15	511	062	$\sqrt{27} : \sqrt{40} : \sqrt{51} = 1 : 1.217 : 1.374$	75° 55'
* 1 3 16	151	620	$\sqrt{27} : \sqrt{40} : \sqrt{59} = 1 : 1.217 : 1.478$	83° 01'
* 4 3 15	511	062	$\sqrt{27} : \sqrt{40} : \sqrt{59} = 1 : 1.217 : 1.478$	83° 01'
* 6 9 17	153	640	$\sqrt{35} : \sqrt{52} : \sqrt{59} = 1 : 1.219 : 1.298$	70° 51'
* 9 10 15	531	064	$\sqrt{36} : \sqrt{52} : \sqrt{59} = 1 : 1.219 : 1.298$	70° 51'
* 10 11 15	153	604	$\sqrt{35} : \sqrt{62} : \sqrt{75} = 1 : 1.219 : 1.464$	81° 55'
* 2 3 21	351	640	$\sqrt{35} : \sqrt{52} : \sqrt{83} = 1 : 1.219 : 1.540$	87° 19'
0 1 2	400	242	$\sqrt{16} : \sqrt{24} : \sqrt{24} = 1 : 1.225 : 1.225$	65° 55'
* 1 9 14	511	353	$\sqrt{27} : \sqrt{43} : \sqrt{56} = 1 : 1.262 : 1.440$	78° 09'
* 7 11 16	153	624	$\sqrt{35} : \sqrt{56} : \sqrt{59} = 1 : 1.265 : 1.298$	68° 49'

3. Táblázat (folytatás)

$[u \ v \ w]$	$h_1 \ k_1 \ l_1$	$h_2 \ k_2 \ l_2$	$R_1 : R_2 : R_3$	α
* 1 8 19	531	642	$\sqrt{35} : \sqrt{56} : \sqrt{59} = 1 : 1.265 : 1.298$	68° 49'
* 3 11 18	531	264	$\sqrt{35} : \sqrt{56} : \sqrt{67} = 1 : 1.265 : 1.384$	74° 16'
* 8 11 17	513	462	$\sqrt{35} : \sqrt{56} : \sqrt{75} = 1 : 1.265 : 1.464$	79° 35'
* 7 13 16	513	264	$\sqrt{35} : \sqrt{56} : \sqrt{75} = 1 : 1.265 : 1.464$	79° 35'
* 11 13 14	513	264	$\sqrt{35} : \sqrt{56} : \sqrt{83} = 1 : 1.265 : 1.540$	84° 49'
* 5 13 16	442	713	$\sqrt{36} : \sqrt{59} : \sqrt{59} = 1 : 1.280 : 1.280$	67° 01'
* 1 9 20	442	731	$\sqrt{36} : \sqrt{59} : \sqrt{67} = 1 : 1.280 : 1.364$	72° 19'
* 8 13 17	244	731	$\sqrt{36} : \sqrt{59} : \sqrt{83} = 1 : 1.280 : 1.518$	82° 31'
* 1 11 20	442	533	$\sqrt{36} : \sqrt{59} : \sqrt{83} = 1 : 1.280 : 1.518$	82° 31'
* 4 15 17	244	731	$\sqrt{36} : \sqrt{59} : \sqrt{91} = 1 : 1.280 : 1.590$	87° 31'
* 7 15 16	442	535	$\sqrt{36} : \sqrt{59} : \sqrt{91} = 1 : 1.280 : 1.590$	87° 31'
1 3 7	242	620	$\sqrt{24} : \sqrt{40} : \sqrt{56} = 1 : 1.291 : 1.528$	82° 35'
* 7 8 19	331	713	$\sqrt{35} : \sqrt{59} : \sqrt{68} = 1 : 1.298 : 1.394$	73° 23'
* 3 7 20	331	533	$\sqrt{35} : \sqrt{59} : \sqrt{68} = 1 : 1.298 : 1.394$	73° 23'
* 2 11 19	153	731	$\sqrt{35} : \sqrt{59} : \sqrt{72} = 1 : 1.298 : 1.434$	75° 59'
* 7 10 19	153	731	$\sqrt{35} : \sqrt{59} : \sqrt{84} = 1 : 1.298 : 1.549$	83° 41'
* 1 5 22	331	731	$\sqrt{35} : \sqrt{59} : \sqrt{84} = 1 : 1.298 : 1.549$	83° 41'
* 3 14 17	531	355	$\sqrt{35} : \sqrt{59} : \sqrt{84} = 1 : 1.298 : 1.549$	83° 41'
* 10 11 17	531	355	$\sqrt{35} : \sqrt{59} : \sqrt{84} = 1 : 1.298 : 1.549$	83° 41'
* 9 12 17	153	713	$\sqrt{35} : \sqrt{59} : \sqrt{88} = 1 : 1.298 : 1.586$	86° 13'
* 1 3 6	311	331	$\sqrt{11} : \sqrt{19} : \sqrt{20} = 1 : 1.314 : 1.348$	69° 46'
* 3 4 5	311	133	$\sqrt{11} : \sqrt{19} : \sqrt{24} = 1 : 1.314 : 1.477$	78° 01'
* 3 6 11	420	153	$\sqrt{20} : \sqrt{35} : \sqrt{43} = 1 : 1.323 : 1.466$	76° 54'
* 1 2 13	420	351	$\sqrt{20} : \sqrt{35} : \sqrt{51} = 1 : 1.323 : 1.597$	85° 40'
* 5 7 10	402	153	$\sqrt{20} : \sqrt{35} : \sqrt{51} = 1 : 1.323 : 1.597$	85° 40'
* 3 8 13	242	533	$\sqrt{24} : \sqrt{43} : \sqrt{51} = 1 : 1.339 : 1.458$	75° 35'
* 2 9 13	422	353	$\sqrt{24} : \sqrt{43} : \sqrt{59} = 1 : 1.339 : 1.568$	82° 51'
* 1 2 7	131	420	$\sqrt{11} : \sqrt{20} : \sqrt{27} = 1 : 1.348 : 1.567$	82° 15'
* 4 7 9	331	513	$\sqrt{19} : \sqrt{35} : \sqrt{36} = 1 : 1.357 : 1.376$	69° 34'
* 1 3 12	331	351	$\sqrt{19} : \sqrt{35} : \sqrt{40} = 1 : 1.357 : 1.451$	74° 15'
* 3 8 9	133	531	$\sqrt{19} : \sqrt{35} : \sqrt{40} = 1 : 1.357 : 1.451$	74° 15'
* 6 7 9	133	531	$\sqrt{19} : \sqrt{35} : \sqrt{52} = 1 : 1.357 : 1.654$	87° 47'
* 2 3 17	151	711	$\sqrt{27} : \sqrt{51} : \sqrt{52} = 1 : 1.374 : 1.388$	69° 30'
* 3 4 17	131	711	$\sqrt{27} : \sqrt{51} : \sqrt{56} = 1 : 1.374 : 1.440$	72° 45'
* 5 12 13	511	155	$\sqrt{27} : \sqrt{51} : \sqrt{68} = 1 : 1.374 : 1.587$	82° 15'
* 1 3 12	331	442	$\sqrt{19} : \sqrt{36} : \sqrt{51} = 1 : 1.376 : 1.638$	85° 37'
* 5 8 9	331	424	$\sqrt{19} : \sqrt{36} : \sqrt{51} = 1 : 1.376 : 1.638$	85° 37'

3. Táblázat (folytatás)

$[u v w]$	$h_1 k_1 l_1$	$h_2 k_2 l_2$	$R_1 : R_2 : R_3$	α
* 1 10 15	51 $\bar{1}$	06 $\bar{4}$	$\sqrt{27} : \sqrt{52} : \sqrt{59} = 1 : 1.388 : 1.478$	74° 31'
* 2 7 17	51 $\bar{1}$	46 $\bar{2}$	$\sqrt{27} : \sqrt{56} : \sqrt{59} = 1 : 1.440 : 1.478$	72° 01'
* 3 11 14	51 $\bar{1}$	26 $\bar{4}$	$\sqrt{27} : \sqrt{56} : \sqrt{59} = 1 : 1.440 : 1.478$	72° 01'
* 5 9 16	51 $\bar{1}$	26 $\bar{4}$	$\sqrt{27} : \sqrt{56} : \sqrt{67} = 1 : 1.440 : 1.575$	78° 08'
* 1 11 16	51 $\bar{1}$	26 $\bar{4}$	$\sqrt{27} : \sqrt{56} : \sqrt{83} = 1 : 1.440 : 1.753$	90° 00'
* 3 9 10	13 $\bar{3}$	620	$\sqrt{19} : \sqrt{40} : \sqrt{59} = 1 : 1.451 : 1.762$	90° 00'
* 1 8 15	24 $\bar{2}$	71 $\bar{1}$	$\sqrt{24} : \sqrt{51} : \sqrt{59} = 1 : 1.458 : 1.568$	76° 47'
* 4 7 13	42 $\bar{2}$	53 $\bar{1}$	$\sqrt{24} : \sqrt{51} : \sqrt{59} = 1 : 1.458 : 1.568$	76° 47'
* 9 10 11	24 $\bar{2}$	31 $\bar{5}$	$\sqrt{24} : \sqrt{51} : \sqrt{67} = 1 : 1.458 : 1.671$	83° 26'
* 3 9 10	40 $\bar{2}$	35 $\bar{3}$	$\sqrt{20} : \sqrt{43} : \sqrt{51} = 1 : 1.466 : 1.597$	78° 12'
* 3 6 13	420	35 $\bar{3}$	$\sqrt{20} : \sqrt{43} : \sqrt{59} = 1 : 1.466 : 1.718$	86° 05'
* 2 3 7	13 $\bar{1}$	42 $\bar{2}$	$\sqrt{11} : \sqrt{24} : \sqrt{27} = 1 : 1.477 : 1.567$	75° 45'
* 1 4 7	31 $\bar{1}$	24 $\bar{2}$	$\sqrt{11} : \sqrt{24} : \sqrt{35} = 1 : 1.477 : 1.784$	90° 00'
* 1 4 19	13 $\bar{1}$	73 $\bar{1}$	$\sqrt{27} : \sqrt{59} : \sqrt{68} = 1 : 1.478 : 1.587$	76° 58'
* 3 8 17	51 $\bar{1}$	17 $\bar{3}$	$\sqrt{27} : \sqrt{59} : \sqrt{68} = 1 : 1.478 : 1.587$	76° 58'
* 3 4 19	51 $\bar{1}$	37 $\bar{1}$	$\sqrt{27} : \sqrt{59} : \sqrt{72} = 1 : 1.478 : 1.633$	79° 54'
* 5 7 18	51 $\bar{1}$	17 $\bar{3}$	$\sqrt{27} : \sqrt{59} : \sqrt{84} = 1 : 1.478 : 1.764$	88° 34'
* 3 7 12	33 $\bar{1}$	53 $\bar{3}$	$\sqrt{19} : \sqrt{43} : \sqrt{56} = 1 : 1.504 : 1.717$	83° 59'
1 3 7	42 $\bar{2}$	26 $\bar{4}$	$\sqrt{24} : \sqrt{56} : \sqrt{56} = 1 : 1.528 : 1.528$	70° 54'
3 3 7	24 $\bar{2}$	62 $\bar{4}$	$\sqrt{24} : \sqrt{56} : \sqrt{72} = 1 : 1.528 : 1.732$	83° 44'
1 2 4	42 $\bar{2}$	46 $\bar{2}$	$\sqrt{24} : \sqrt{56} : \sqrt{80} = 1 : 1.528 : 1.826$	90° 00'
* 3 3 4	220	31 $\bar{3}$	$\sqrt{8} : \sqrt{19} : \sqrt{19} = 1 : 1.541 : 1.541$	71° 04'
* 1 1 6	220	33 $\bar{1}$	$\sqrt{8} : \sqrt{19} : \sqrt{27} = 1 : 1.541 : 1.837$	90° 00'
* 1 3 8	13 $\bar{1}$	51 $\bar{1}$	$\sqrt{11} : \sqrt{27} : \sqrt{36} = 1 : 1.567 : 1.809$	86° 40'
* 7 10 13	24 $\bar{2}$	71 $\bar{3}$	$\sqrt{24} : \sqrt{59} : \sqrt{59} = 1 : 1.568 : 1.568$	71° 24'
* 3 6 17	24 $\bar{2}$	73 $\bar{1}$	$\sqrt{24} : \sqrt{59} : \sqrt{75} = 1 : 1.568 : 1.768$	83° 54'
* 2 11 13	42 $\bar{2}$	53 $\bar{3}$	$\sqrt{24} : \sqrt{59} : \sqrt{75} = 1 : 1.568 : 1.768$	83° 54'
* 1 8 17	24 $\bar{2}$	73 $\bar{1}$	$\sqrt{24} : \sqrt{59} : \sqrt{83} = 1 : 1.568 : 1.860$	90° 00'
* 1 2 15	420	55 $\bar{1}$	$\sqrt{20} : \sqrt{51} : \sqrt{51} = 1 : 1.597 : 1.597$	71° 45'
* 1 7 14	04 $\bar{2}$	71 $\bar{1}$	$\sqrt{20} : \sqrt{51} : \sqrt{59} = 1 : 1.597 : 1.718$	79° 10'
* 3 10 11	420	13 $\bar{5}$	$\sqrt{20} : \sqrt{51} : \sqrt{59} = 1 : 1.597 : 1.718$	79° 10'
* 3 7 14	04 $\bar{2}$	71 $\bar{1}$	$\sqrt{20} : \sqrt{51} : \sqrt{67} = 1 : 1.597 : 1.830$	86° 25'
* 1 1 2	11 $\bar{1}$	220	$\sqrt{3} : \sqrt{8} : \sqrt{11} = 1 : 1.633 : 1.915$	90° 00'
* 3 10 11	13 $\bar{3}$	71 $\bar{1}$	$\sqrt{19} : \sqrt{51} : \sqrt{56} = 1 : 1.638 : 1.717$	77° 00'
* 7 9 10	31 $\bar{3}$	53 $\bar{1}$	$\sqrt{19} : \sqrt{51} : \sqrt{56} = 1 : 1.638 : 1.717$	77° 00'
* 1 4 15	33 $\bar{1}$	35 $\bar{1}$	$\sqrt{19} : \sqrt{51} : \sqrt{68} = 1 : 1.638 : 1.892$	88° 10'
* 2 3 13	33 $\bar{1}$	640	$\sqrt{19} : \sqrt{52} : \sqrt{59} = 1 : 1.654 : 1.762$	79° 00'

3. Táblázat (folytatás)

$[u\ v\ w]$	$h_1\ k_1\ l_1$	$h_2\ k_2\ l_2$	$R_1 : R_2 : R_3$	α
* 6 9 11	13 $\bar{3}$	$\bar{6}40$	$\sqrt{19} : \sqrt{52} : \sqrt{59} = 1 : 1.654 : 1.762$	79° 00'
* 0 1 3	200	13 $\bar{1}$	$\sqrt{4} : \sqrt{11} : \sqrt{11} = 1 : 1.658 : 1.658$	72° 27'
* 5 9 12	3 $\bar{3}1$	62 $\bar{4}$	$\sqrt{19} : \sqrt{56} : \sqrt{59} = 1 : 1.717 : 1.762$	75° 48'
* 1 $\bar{6}$ 6 15	3 $\bar{3}1$	64 $\bar{2}$	$\sqrt{19} : \sqrt{56} : \sqrt{67} = 1 : 1.717 : 1.878$	82° 57'
* 8 9 11	31 $\bar{3}$	46 $\bar{2}$	$\sqrt{19} : \sqrt{56} : \sqrt{75} = 1 : 1.717 : 1.987$	90° 00'
* 5 7 14	04 $\bar{2}$	$\bar{7}31$	$\sqrt{20} : \sqrt{59} : \sqrt{59} = 1 : 1.718 : 1.718$	73° 05'
* $\bar{1}$ $\bar{2}$ $\bar{17}$	4 $\bar{2}0$	3 $\bar{7}1$	$\sqrt{20} : \sqrt{59} : \sqrt{75} = 1 : 1.718 : 1.936$	86° 40'
* 5 10 13	4 $\bar{2}0$	35 $\bar{5}$	$\sqrt{20} : \sqrt{59} : \sqrt{75} = 1 : 1.718 : 1.936$	86° 40'
1 1 3	2 $\bar{2}0$	42 $\bar{2}$	$\sqrt{8} : \sqrt{24} : \sqrt{24} = 1 : 1.732 : 1.732$	73° 13'
* 3 11 12	13 $\bar{3}$	73 $\bar{1}$	$\sqrt{19} : \sqrt{59} : \sqrt{68} = 1 : 1.762 : 1.892$	81° 25'
* $\bar{2}$ 7 $\bar{15}$	3 $\bar{3}1$	55 $\bar{3}$	$\sqrt{19} : \sqrt{59} : \sqrt{72} = 1 : 1.762 : 1.947$	84° 52'
* 1 5 8	31 $\bar{1}$	$\bar{15}\bar{3}$	$\sqrt{11} : \sqrt{35} : \sqrt{36} = 1 : 1.784 : 1.809$	75° 14'
* 4 5 7	3 $\bar{1}\bar{1}$	15 $\bar{3}$	$\sqrt{11} : \sqrt{35} : \sqrt{36} = 1 : 1.784 : 1.809$	75° 14'
* $\bar{2}$ 3 9	31 $\bar{1}$	35 $\bar{1}$	$\sqrt{11} : \sqrt{35} : \sqrt{40} = 1 : 1.784 : 1.907$	81° 12'
* 2 5 5	02 $\bar{2}$	5 $\bar{1}1$	$\sqrt{8} : \sqrt{27} : \sqrt{35} = 1 : 1.837 : 2.092$	90° 00'
0 2 3	400	26 $\bar{4}$	$\sqrt{16} : \sqrt{56} : \sqrt{56} = 1 : 1.871 : 1.871$	74° 30'
* 3 4 9	13 $\bar{1}$	60 $\bar{2}$	$\sqrt{11} : \sqrt{40} : \sqrt{43} = 1 : 1.907 : 1.977$	79° 00'
* 1 3 10	13 $\bar{1}$	$\bar{6}20$	$\sqrt{11} : \sqrt{40} : \sqrt{51} = 1 : 1.907 : 2.153$	90° 00'
* $\bar{1}$ $\bar{6}$ 9	31 $\bar{1}$	35 $\bar{3}$	$\sqrt{11} : \sqrt{43} : \sqrt{52} = 1 : 1.977 : 2.174$	87° 22'
* 1 1 8	2 $\bar{2}0$	53 $\bar{1}$	$\sqrt{8} : \sqrt{35} : \sqrt{35} = 1 : 2.092 : 2.092$	76° 10'
* 4 5 5	02 $\bar{2}$	53 $\bar{1}$	$\sqrt{8} : \sqrt{35} : \sqrt{35} = 1 : 2.092 : 2.092$	76° 10'
* $\bar{2}$ 3 $\bar{11}$	13 $\bar{1}$	7 $\bar{1}\bar{1}$	$\sqrt{11} : \sqrt{51} : \sqrt{52} = 1 : 2.153 : 2.174$	77° 49'
* 1 4 11	13 $\bar{1}$	71 $\bar{1}$	$\sqrt{11} : \sqrt{51} : \sqrt{56} = 1 : 2.153 : 2.256$	82° 43'
* 5 7 8	3 $\bar{1}\bar{1}$	15 $\bar{5}$	$\sqrt{11} : \sqrt{51} : \sqrt{56} = 1 : 2.153 : 2.256$	82° 43'
* 5 6 9	3 $\bar{1}\bar{1}$	06 $\bar{4}$	$\sqrt{11} : \sqrt{52} : \sqrt{59} = 1 : 2.174 : 2.316$	85° 12'
1 3 3	02 $\bar{2}$	$\bar{6}20$	$\sqrt{8} : \sqrt{40} : \sqrt{40} = 1 : 2.236 : 2.236$	77° 05'
* $\bar{2}$ 5 $\bar{11}$	31 $\bar{1}$	46 $\bar{2}$	$\sqrt{11} : \sqrt{56} : \sqrt{59} = 1 : 2.256 : 2.316$	80° 44'
* 1 7 10	31 $\bar{1}$	26 $\bar{4}$	$\sqrt{11} : \sqrt{56} : \sqrt{59} = 1 : 2.256 : 2.316$	80° 44'
* 4 5 11	13 $\bar{1}$	71 $\bar{3}$	$\sqrt{11} : \sqrt{59} : \sqrt{68} = 1 : 2.316 : 2.486$	87° 45'
* 3 3 8	2 $\bar{2}0$	53 $\bar{3}$	$\sqrt{8} : \sqrt{43} : \sqrt{43} = 1 : 2.318 : 2.318$	77° 33'
* 5 5 6	2 $\bar{2}0$	33 $\bar{5}$	$\sqrt{8} : \sqrt{43} : \sqrt{51} = 1 : 2.318 : 2.525$	90° 00'
* 1 2 3	11 $\bar{1}$	33 $\bar{1}$	$\sqrt{3} : \sqrt{19} : \sqrt{20} = 1 : 2.517 : 2.582$	82° 23'
* 2 7 7	02 $\bar{2}$	7 $\bar{1}1$	$\sqrt{8} : \sqrt{51} : \sqrt{59} = 1 : 2.525 : 2.716$	90° 00'
* 1 1 10	2 $\bar{2}0$	55 $\bar{1}$	$\sqrt{8} : \sqrt{51} : \sqrt{59} = 1 : 2.525 : 2.716$	90° 00'
* 0 1 5	200	15 $\bar{1}$	$\sqrt{4} : \sqrt{27} : \sqrt{27} = 1 : 2.598 : 2.598$	78° 54'
1 1 5	2 $\bar{2}0$	64 $\bar{2}$	$\sqrt{8} : \sqrt{56} : \sqrt{56} = 1 : 2.646 : 2.646$	79° 06'
* 4 7 7	02 $\bar{2}$	7 $\bar{3}1$	$\sqrt{8} : \sqrt{59} : \sqrt{59} = 1 : 2.716 : 2.716$	79° 23'

3. Táblázat (folytatás)

$[u\ v\ w]$	$h_1\ k_1\ l_1$	$h_2\ k_2\ l_2$	$R_1 : R_2 : R_3$	α
* 5 5 8	220	53 $\bar{3}$	$\sqrt{8} : \sqrt{59} : \sqrt{59} = 1 : 2.716 : 2.716$	79° 23'
* 3 3 10	220	55 $\bar{3}$	$\sqrt{8} : \sqrt{59} : \sqrt{67} = 1 : 2.716 : 2.894$	90° 00'
* 0 3 5	200	15 $\bar{3}$	$\sqrt{4} : \sqrt{35} : \sqrt{35} = 1 : 2.958 : 2.958$	80° 16'
* $\bar{1}$ $\bar{3}$ 4	11 $\bar{1}$	531	$\sqrt{3} : \sqrt{35} : \sqrt{36} = 1 : 3.416 : 3.464$	84° 24'
* 0 $\bar{1}$ 7	200	17 $\bar{1}$	$\sqrt{4} : \sqrt{51} : \sqrt{51} = 1 : 3.571 : 3.571$	81° 57'
* 0 $\bar{3}$ 7	200	17 $\bar{3}$	$\sqrt{4} : \sqrt{59} : \sqrt{59} = 1 : 3.841 : 3.841$	82° 31'
* 2 3 5	11 $\bar{1}$	55 $\bar{1}$	$\sqrt{3} : \sqrt{51} : \sqrt{52} = 1 : 4.123 : 4.163$	85° 22'
* 1 4 5	11 $\bar{1}$	64 $\bar{2}$	$\sqrt{3} : \sqrt{56} : \sqrt{59} = 1 : 4.320 : 4.435$	90° 00'

Az elektronmikroszkóp adataiból ismert „eszközkonstans” $L\lambda = 14,2 \pm 0,3$ mmÅ. (Az itt és a következő szövegben megadott hiba, az egyetlen megfigyelés valószínű hibáját jelenti). Közöséges milliméteres skálát használva a fényképező lemezen a következő hosszúságokat mérjük:

$$R_1 = (7,1 \pm 0,2) \text{ mm},$$

$$R_2 = (17,7 \pm 0,2) \text{ mm},$$

$$R_3 = (18,3 \pm 0,2) \text{ mm} \quad (10)$$

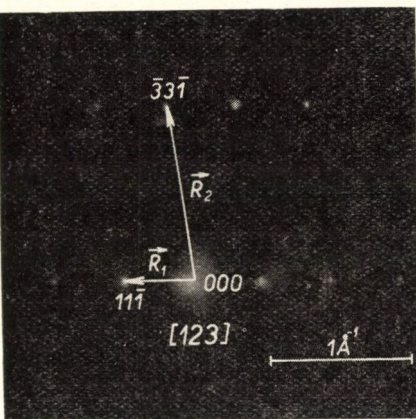
Ezek aránya:

$$R_1 : R_2 : R_3 = 1 : (2,49 \pm 0,08) : (2,58 \pm 0,08) \quad (11)$$

Az *f. c. c.* szerkezet reciprokrács-síkjaira adott táblázatban (2. táblázat) megtalálható, hogy a sugár az $\langle 1\ 2\ 3 \rangle$ irányok valamelyikével párhuzamos, amelyre a kiszámított arány

$$R_1 : R_2 : R_3 = 1 : 2,517 : 2,582$$

5. ábra. Rézlemez diffrakciós képe. $\vec{R}_3 = \vec{R}_2 - \vec{R}_1$. Az $[1\ 2\ 3]$ kristálytani irány megegyezik az elektronsugár irányával.



mos az $\langle 1\ 2\ 3 \rangle$ iránynak megfelelő (6) összefüggés 24 kombinációjának valamelyikével.

Az \vec{R}_1 és \vec{R}_2 vektorok végpontjaiban levő reflexiók Laue-indexei 11 $\bar{1}$ és a 33 $\bar{1}$.

Eldöntendő, hogy milyen mértékben lehetünk biztosak abban, hogy a kép a reciprokrács $\{1\ 2\ 3\}$ síkját reprezentálja és nem valamelyik más síkot, amelynek közel ugyanakkora $R_1 : R_2 : R_3$ hányadosa van. Szigorúan véve minden olyan $R_1 : R_2 : R_3$ arányú reciprokrács-síkot figyelembe kell venni, amely a mért érték körüli bizonytalansági határon belül esik. (Az a valószínűség, hogy a mért érték ezen az intervallumon belül van, 0,997 körüli érték.) Véve a (11) összefüggésben levő valószínű hiba 4,45-szörösét, az 1:2,13:2,22 aránytól az 1:2,85:2,94 arányig terjedő intervallumot

4. TÁBLÁZAT
Legszorosabb illeszkedésű hatszöges (h.c.p) rács

$[u\ v\ w]$	$h_1\ k_1\ l_1$	$h_2\ k_2\ l_2$	$R_1 : R_2 : R_3$	α
0 0 1	$\bar{1}\bar{1}0$	100	$\sqrt{32} : \sqrt{32} : \sqrt{32} = 1 : 1 : 1$	$60^\circ 00'$
2 4 1	$10\bar{2}$	$\bar{1}1\bar{2}$	$\sqrt{68} : \sqrt{68} : \sqrt{96} = 1 : 1 : 1.188$	$72^\circ 54'$
* 1 2 1	$\bar{1}1\bar{1}$	$\bar{1}01$	$\sqrt{41} : \sqrt{41} : \sqrt{68} = 1 : 1 : 1.288$	$80^\circ 10'$
* 4 11 1	$10\bar{4}$	$\bar{2}1\bar{3}$	$\sqrt{176} : \sqrt{177} : \sqrt{233} = 1 : 1.003 : 1.151$	$70^\circ 08''$
* 8 15 3	$01\bar{5}$	$\bar{3}2\bar{2}$	$\sqrt{257} : \sqrt{260} : \sqrt{305} = 1 : 1.006 : 1.089$	$65^\circ 48''$
* 10 17 2	$10\bar{5}$	$\bar{3}2\bar{2}$	$\sqrt{257} : \sqrt{260} : \sqrt{465} = 1 : 1.006 : 1.345$	$84^\circ 14''$
* 5 17 1	$10\bar{5}$	$\bar{3}1\bar{2}$	$\sqrt{257} : \sqrt{260} : \sqrt{497} = 1 : 1.006 : 1.391$	$87^\circ 47'$
* 9 14 1	$\bar{3}21$	$2\bar{1}4$	$\sqrt{233} : \sqrt{240} : \sqrt{257} = 1 : 1.015 : 1.050$	$62^\circ 50''$
* 3 13 4	$\bar{3}\bar{1}1$	$11\bar{4}$	$\sqrt{233} : \sqrt{240} : \sqrt{253} = 1 : 1.015 : 1.231$	$75^\circ 18''$
* 3 5 4	$11\bar{2}$	$\bar{2}2\bar{1}$	$\sqrt{132} : \sqrt{137} : \sqrt{233} = 1 : 1.019 : 1.329$	$82^\circ 18''$
* 3 7 1	$2\bar{1}1$	$10\bar{3}$	$\sqrt{105} : \sqrt{113} : \sqrt{176} = 1 : 1.037 : 1.295$	$78^\circ 53''$
6 16 1	$\bar{2}1\bar{4}$	$\bar{3}12$	$\sqrt{240} : \sqrt{260} : \sqrt{356} = 1 : 1.041 : 1.218$	$73^\circ 15''$
6 14 5	$11\bar{4}$	$\bar{3}2\bar{2}$	$\sqrt{240} : \sqrt{260} : \sqrt{452} = 1 : 1.041 : 1.372$	$84^\circ 29''$
* 2 5 1	$\bar{3}\bar{1}\bar{1}$	$01\bar{5}$	$\sqrt{233} : \sqrt{257} : \sqrt{368} = 1 : 1.050 : 1.257$	$75^\circ 34'$
* 5 16 1	$\bar{3}\bar{1}1$	$10\bar{5}$	$\sqrt{233} : \sqrt{257} : \sqrt{420} = 1 : 1.050 : 1.343$	$81^\circ 47''$
* 11 15 3	$\bar{3}2\bar{1}$	$01\bar{5}$	$\sqrt{233} : \sqrt{257} : \sqrt{432} = 1 : 1.050 : 1.362$	$83^\circ 12'$
* 5 11 4	$\bar{2}23$	$\bar{3}\bar{1}\bar{1}$	$\sqrt{209} : \sqrt{233} : \sqrt{240} = 1 : 1.056 : 1.072$	$62^\circ 46'$
* 4 9 6	$02\bar{3}$	$\bar{3}2\bar{1}$	$\sqrt{209} : \sqrt{233} : \sqrt{324} = 1 : 1.056 : 1.245$	$74^\circ 30''$
* 8 9 6	$02\bar{3}$	$\bar{3}21$	$\sqrt{209} : \sqrt{233} : \sqrt{432} = 1 : 1.056 : 1.438$	$88^\circ 42''$
* 5 15 1	$\bar{3}\bar{1}0$	$10\bar{5}$	$\sqrt{224} : \sqrt{257} : \sqrt{321} = 1 : 1.071 : 1.197$	$70^\circ 31''$
* 10 15 2	$\bar{3}20$	$10\bar{5}$	$\sqrt{224} : \sqrt{257} : \sqrt{353} = 1 : 1.071 : 1.255$	$74^\circ 32''$
* 5 15 3	$\bar{3}\bar{1}0$	$01\bar{5}$	$\sqrt{224} : \sqrt{257} : \sqrt{449} = 1 : 1.071 : 1.416$	$86^\circ 11'$
* 3 14 2	$\bar{2}03$	$2\bar{1}4$	$\sqrt{209} : \sqrt{240} : \sqrt{425} = 1 : 1.072 : 1.426$	$86^\circ 56''$
* 1 6 2	$01\bar{3}$	$\bar{2}1\bar{2}$	$\sqrt{113} : \sqrt{132} : \sqrt{137} = 1 : 1.081 : 1.101$	$63^\circ 46''$
* 3 8 1	$10\bar{3}$	$\bar{2}1\bar{2}$	$\sqrt{113} : \sqrt{132} : \sqrt{233} = 1 : 1.081 : 1.436$	$87^\circ 11''$
* 3 6 1	$2\bar{1}0$	$10\bar{3}$	$\sqrt{96} : \sqrt{113} : \sqrt{113} = 1 : 1.085 : 1.085$	$62^\circ 33''$
* 3 6 2	$2\bar{1}0$	$01\bar{3}$	$\sqrt{96} : \sqrt{113} : \sqrt{209} = 1 : 1.085 : 1.475$	$90^\circ 00''$
* 3 9 4	$\bar{1}\bar{1}3$	$\bar{2}23$	$\sqrt{177} : \sqrt{209} : \sqrt{224} = 1 : 1.087 : 1.125$	$65^\circ 06''$
* 3 12 2	$2\bar{1}3$	$20\bar{3}$	$\sqrt{177} : \sqrt{209} : \sqrt{356} = 1 : 1.087 : 1.418$	$85^\circ 32'$
* 8 11 2	$\bar{1}04$	$\bar{2}23$	$\sqrt{176} : \sqrt{209} : \sqrt{233} = 1 : 1.090 : 1.151$	$66^\circ 39''$
* 1 7 2	$1\bar{1}3$	$20\bar{1}$	$\sqrt{113} : \sqrt{137} : \sqrt{240} = 1 : 1.101 : 1.457$	$87^\circ 42''$
* 3 13 2	$\bar{2}03$	$1\bar{1}5$	$\sqrt{209} : \sqrt{257} : \sqrt{260} = 1 : 1.109 : 1.115$	$63^\circ 37''$
* 2 9 6	$02\bar{3}$	$\bar{3}2\bar{2}$	$\sqrt{209} : \sqrt{260} : \sqrt{297} = 1 : 1.115 : 1.192$	$68^\circ 21'$
* 7 13 4	$\bar{2}23$	$\bar{3}\bar{1}\bar{2}$	$\sqrt{209} : \sqrt{260} : \sqrt{321} = 1 : 1.115 : 1.239$	$71^\circ 29''$
* 9 10 6	$\bar{2}03$	$\bar{2}32$	$\sqrt{209} : \sqrt{260} : \sqrt{425} = 1 : 1.115 : 1.426$	$84^\circ 35''$
8 12 1	$\bar{1}\bar{1}4$	$\bar{3}20$	$\sqrt{176} : \sqrt{224} : \sqrt{240} = 1 : 1.128 : 1.168$	$66^\circ 14''$

4. Táblázat (folytatás)

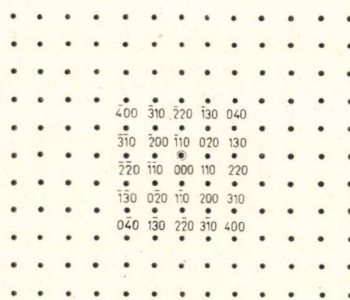
$[u v w]$	$h_1 k_1 l_1$	$h_2 k_2 l_2$	$R_1 : R_2 : R_3$	α
8 12 3	01 $\bar{4}$	$\bar{3}20$	$\sqrt{176} : \sqrt{224} : \sqrt{368} = 1 : 1.128 : 1.446$	85° 23'
* 0 1 1	100	01 $\bar{1}$	$\sqrt{32} : \sqrt{41} : \sqrt{41} = 1 : 1.132 : 1.132$	63° 47'
* 1 8 2	20 $\bar{1}$	01 $\bar{4}$	$\sqrt{137} : \sqrt{176} : \sqrt{177} = 1 : 1.133 : 1.137$	64° 02'
* 1 9 2	$\bar{2}01$	1 $\bar{1}4$	$\sqrt{137} : \sqrt{176} : \sqrt{305} = 1 : 1.133 : 1.492$	88° 31'
* 2 7 4	20 $\bar{1}$	$\bar{1}2\bar{3}$	$\sqrt{137} : \sqrt{177} : \sqrt{260} = 1 : 1.137 : 1.378$	80° 01'
* 1 3 4	$\bar{1}11$	$\bar{2}\bar{2}1$	$\sqrt{105} : \sqrt{137} : \sqrt{224} = 1 : 1.142 : 1.461$	85° 42'
* 7 12 3	01 $\bar{4}$	$\bar{3}2\bar{1}$	$\sqrt{176} : \sqrt{233} : \sqrt{305} = 1 : 1.151 : 1.316$	75° 07'
* 9 13 1	$\bar{1}1\bar{4}$	$\bar{3}21$	$\sqrt{176} : \sqrt{233} : \sqrt{321} = 1 : 1.151 : 1.351$	77° 27'
* 5 13 2	$\bar{1}1\bar{4}$	$\bar{3}11$	$\sqrt{176} : \sqrt{233} : \sqrt{353} = 1 : 1.151 : 1.416$	82° 03'
6 10 1	$\bar{2}\bar{1}\bar{2}$	$\bar{1}1\bar{4}$	$\sqrt{132} : \sqrt{176} : \sqrt{260} = 1 : 1.155 : 1.403$	80° 56'
* 1 2 4	$\bar{2}\bar{1}0$	02 $\bar{1}$	$\sqrt{96} : \sqrt{137} : \sqrt{233} = 1 : 1.195 : 1.558$	90° 00'
* 8 13 1	$\bar{2}\bar{1}\bar{3}$	$\bar{1}1\bar{5}$	$\sqrt{177} : \sqrt{257} : \sqrt{260} = 1 : 1.205 : 1.212$	65° 56'
* 10 11 4	$\bar{1}2\bar{3}$	$\bar{3}22$	$\sqrt{177} : \sqrt{260} : \sqrt{353} = 1 : 1.212 : 1.412$	78° 43'
* 4 11 5	$\bar{1}1\bar{3}$	$\bar{3}2\bar{2}$	$\sqrt{177} : \sqrt{260} : \sqrt{425} = 1 : 1.212 : 1.550$	88° 24'
2 12 3	01 $\bar{4}$	$\bar{3}1\bar{2}$	$\sqrt{176} : \sqrt{260} : \sqrt{324} = 1 : 1.215 : 1.357$	74° 49'
10 14 1	$\bar{1}1\bar{4}$	$\bar{3}22$	$\sqrt{176} : \sqrt{260} : \sqrt{420} = 1 : 1.2 : 1.54515$	87° 51'
* 3 5 1	$\bar{1}1\bar{2}$	$\bar{2}11$	$\sqrt{68} : \sqrt{105} : \sqrt{113} = 1 : 1.243 : 1.289$	69° 12'
* 1 4 2	01 $\bar{2}$	$\bar{2}1\bar{1}$	$\sqrt{68} : \sqrt{105} : \sqrt{137} = 1 : 1.243 : 1.419$	77° 42'
* 3 9 1	$\bar{1}03$	$\bar{2}\bar{1}\bar{3}$	$\sqrt{113} : \sqrt{177} : \sqrt{224} = 1 : 1.252 : 1.408$	76° 30'
* 1 7 4	$\bar{1}\bar{1}2$	$\bar{2}\bar{2}\bar{3}$	$\sqrt{132} : \sqrt{209} : \sqrt{233} = 1 : 1.258 : 1.329$	71° 02'
* 3 10 2	$\bar{2}\bar{1}\bar{2}$	$\bar{2}0\bar{3}$	$\sqrt{132} : \sqrt{209} : \sqrt{257} = 1 : 1.258 : 1.395$	75° 21'
* 2 3 6	02 $\bar{1}$	$\bar{3}20$	$\sqrt{137} : \sqrt{224} : \sqrt{297} = 1 : 1.279 : 1.472$	79° 28'
* 1 3 1	10 $\bar{1}$	$\bar{1}1\bar{2}$	$\sqrt{41} : \sqrt{68} : \sqrt{105} = 1 : 1.288 : 1.600$	87° 50'
* 5 8 2	$\bar{2}\bar{1}\bar{1}$	01 $\bar{4}$	$\sqrt{105} : \sqrt{176} : \sqrt{209} = 1 : 1.295 : 1.411$	74° 39'
* 4 9 1	$\bar{2}\bar{1}1$	10 $\bar{4}$	$\sqrt{105} : \sqrt{176} : \sqrt{257} = 1 : 1.295 : 1.564$	84° 56'
* 1 4 6	$\bar{2}\bar{2}1$	$\bar{2}1\bar{1}$	$\sqrt{137} : \sqrt{233} : \sqrt{324} = 1 : 1.304 : 1.538$	82° 36'
* 9 10 2	$\bar{2}\bar{2}1$	$\bar{2}1\bar{4}$	$\sqrt{137} : \sqrt{240} : \sqrt{257} = 1 : 1.324 : 1.370$	70° 41'
* 2 9 4	20 $\bar{1}$	$\bar{1}2\bar{4}$	$\sqrt{137} : \sqrt{240} : \sqrt{305} = 1 : 1.324 : 1.492$	78° 33'
8 10 3	$\bar{2}\bar{1}\bar{2}$	$\bar{1}2\bar{4}$	$\sqrt{132} : \sqrt{240} : \sqrt{324} = 1 : 1.348 : 1.567$	82° 15'
4 8 1	$\bar{2}\bar{1}0$	10 $\bar{4}$	$\sqrt{96} : \sqrt{176} : \sqrt{176} = 1 : 1.354 : 1.354$	68° 20'
* 6 9 2	10 $\bar{3}$	$\bar{2}\bar{2}\bar{3}$	$\sqrt{113} : \sqrt{209} : \sqrt{224} = 1 : 1.360 : 1.408$	71° 24'
* 1 11 2	$\bar{2}01$	1 $\bar{1}5$	$\sqrt{137} : \sqrt{257} : \sqrt{368} = 1 : 1.370 : 1.639$	86° 02'
* 3 5 6	20 $\bar{1}$	$\bar{1}3\bar{2}$	$\sqrt{137} : \sqrt{260} : \sqrt{297} = 1 : 1.378 : 1.472$	74° 38'
4 6 1	$\bar{1}1\bar{2}$	$\bar{2}12$	$\sqrt{68} : \sqrt{132} : \sqrt{176} = 1 : 1.393 : 1.609$	82° 43'
* 7 12 1	$\bar{2}\bar{1}\bar{2}$	$\bar{1}1\bar{5}$	$\sqrt{132} : \sqrt{257} : \sqrt{305} = 1 : 1.395 : 1.520$	76° 49'
* 2 3 1	01 $\bar{3}$	$\bar{3}20$	$\sqrt{113} : \sqrt{224} : \sqrt{305} = 1 : 1.408 : 1.643$	84° 14'
* 5 6 4	$\bar{2}\bar{1}\bar{1}$	02 $\bar{3}$	$\sqrt{105} : \sqrt{209} : \sqrt{260} = 1 : 1.411 : 1.574$	79° 30'

4. Táblázat (folytatás)

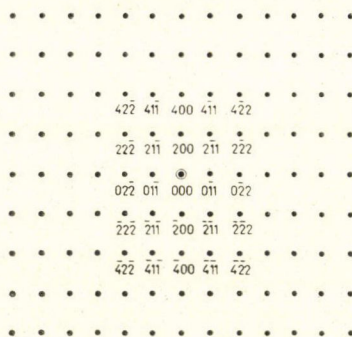
[u v w]			$h_1 k_1 l_1$	$h_2 k_2 l_2$	$R_1 : R_2 : R_3$	α	
*	1	5	2	1 $\bar{1}$ 2	20 $\bar{1}$	$\sqrt{68} : \sqrt{137} : \sqrt{177} = 1 : 1.419 : 1.613$	81° 40'
*	7	10	1	$\bar{1}$ 1 $\bar{3}$	$\bar{3}$ 21	$\sqrt{113} : \sqrt{233} : \sqrt{240} = 1 : 1.436 : 1.457$	70° 56'
*	5	9	3	01 $\bar{3}$	$\bar{3}$ 2 $\bar{1}$	$\sqrt{113} : \sqrt{233} : \sqrt{260} = 1 : 1.436 : 1.517$	74° 38'
*	2	9	3	01 $\bar{3}$	$\bar{3}$ 1 $\bar{1}$	$\sqrt{113} : \sqrt{233} : \sqrt{324} = 1 : 1.436 : 1.693$	86° 07'
	0	2	1	100	01 $\bar{2}$	$\sqrt{32} : \sqrt{68} : \sqrt{68} = 1 : 1.458 : 1.458$	69° 56'
*	3	6	4	2 $\bar{1}$ 0	02 $\bar{3}$	$\sqrt{96} : \sqrt{209} : \sqrt{305} = 1 : 1.475 : 1.782$	90° 00'
*	1	9	3	01 $\bar{3}$	$\bar{3}$ 1 $\bar{2}$	$\sqrt{113} : \sqrt{260} : \sqrt{297} = 1 : 1.517 : 1.621$	77° 11'
*	8	11	1	$\bar{1}$ 1 $\bar{3}$	$\bar{3}$ 22	$\sqrt{113} : \sqrt{260} : \sqrt{321} = 1 : 1.517 : 1.685$	81° 17'
*	5	11	2	$\bar{1}$ 1 $\bar{3}$	$\bar{3}$ 12	$\sqrt{113} : \sqrt{260} : \sqrt{353} = 1 : 1.517 : 1.767$	86° 39'
*	1	2	2	01 $\bar{1}$	$\bar{2}$ 10	$\sqrt{41} : \sqrt{96} : \sqrt{137} = 1 : 1.530 : 1.828$	90° 00'
*	5	11	1	2 $\bar{1}$ 1	10 $\bar{5}$	$\sqrt{105} : \sqrt{257} : \sqrt{356} = 1 : 1.564 : 1.841$	88° 57'
*	2	7	1	$\bar{1}$ 02	2 $\bar{1}$ 3	$\sqrt{68} : \sqrt{177} : \sqrt{233} = 1 : 1.613 : 1.851$	86° 52'
	1	2	0	00 $\bar{2}$	$\bar{2}$ 10	$\sqrt{36} : \sqrt{96} : \sqrt{132} = 1 : 1.633 : 1.915$	90° 00'
*	5	10	1	2 $\bar{1}$ 0	10 $\bar{5}$	$\sqrt{96} : \sqrt{257} : \sqrt{257} = 1 : 1.636 : 1.636$	72° 12'
*	5	10	2	2 $\bar{1}$ 0	01 $\bar{5}$	$\sqrt{96} : \sqrt{257} : \sqrt{353} = 1 : 1.636 : 1.918$	90° 00'
*	1	4	1	10 $\bar{1}$	$\bar{1}$ 1 $\bar{3}$	$\sqrt{41} : \sqrt{113} : \sqrt{132} = 1 : 1.660 : 1.794$	80° 42'
*	4	7	2	10 $\bar{2}$	$\bar{2}$ 2 $\bar{3}$	$\sqrt{68} : \sqrt{209} : \sqrt{233} = 1 : 1.753 : 1.851$	79° 22'
*	2	3	2	10 $\bar{1}$	$\bar{1}$ 2 $\bar{2}$	$\sqrt{41} : \sqrt{132} : \sqrt{137} = 1 : 1.794 : 1.828$	75° 50'
*	0	1	2	100	$\bar{1}$ 2 $\bar{1}$	$\sqrt{32} : \sqrt{105} : \sqrt{137} = 1 : 1.811 : 2.069$	90° 00'
	4	6	3	01 $\bar{2}$	$\bar{3}$ 20	$\sqrt{68} : \sqrt{224} : \sqrt{260} = 1 : 1.815 : 1.955$	82° 33'
*	1	6	3	01 $\bar{2}$	$\bar{3}$ 1 $\bar{1}$	$\sqrt{68} : \sqrt{233} : \sqrt{297} = 1 : 1.851 : 2.090$	89° 05'
*	0	3	1	100	01 $\bar{5}$	$\sqrt{32} : \sqrt{113} : \sqrt{113} = 1 : 1.879 : 1.879$	74° 34'
	2	8	1	$\bar{1}$ 02	2 $\bar{1}$ 4	$\sqrt{68} : \sqrt{240} : \sqrt{260} = 1 : 1.879 : 1.955$	79° 10'
*	0	1	0	00 $\bar{1}$	$\bar{1}$ 00	$\sqrt{9} : \sqrt{32} : \sqrt{41} = 1 : 1.886 : 2.134$	90° 00'
*	1	5	1	10 $\bar{1}$	$\bar{1}$ 1 $\bar{4}$	$\sqrt{41} : \sqrt{176} : \sqrt{177} = 1 : 2.072 : 2.078$	76° 23'
*	3	5	2	1 $\bar{1}$ 1	20 $\bar{3}$	$\sqrt{41} : \sqrt{209} : \sqrt{240} = 1 : 2.258 : 2.419$	86° 54'
*	2	3	3	01 $\bar{1}$	$\bar{3}$ 20	$\sqrt{41} : \sqrt{224} : \sqrt{233} = 1 : 2.337 : 2.384$	80° 23'
	0	4	1	100	01 $\bar{4}$	$\sqrt{32} : \sqrt{176} : \sqrt{176} = 1 : 2.345 : 2.345$	77° 41'
*	0	3	2	100	$\bar{1}$ 2 $\bar{3}$	$\sqrt{32} : \sqrt{177} : \sqrt{209} = 1 : 2.352 : 2.556$	90° 00'
*	5	6	1	$\bar{1}$ 1 $\bar{1}$	$\bar{2}$ 14	$\sqrt{41} : \sqrt{240} : \sqrt{257} = 1 : 2.419 : 2.504$	83° 03'
*	3	4	3	10 $\bar{1}$	$\bar{2}$ 3 $\bar{2}$	$\sqrt{41} : \sqrt{260} : \sqrt{297} = 1 : 2.518 : 2.691$	88° 53'
*	1	1	3	1 $\bar{1}$ 0	21 $\bar{1}$	$\sqrt{32} : \sqrt{233} : \sqrt{233} = 1 : 2.698 : 2.698$	79° 19'
*	0	5	1	100	01 $\bar{5}$	$\sqrt{32} : \sqrt{257} : \sqrt{257} = 1 : 2.834 : 2.834$	79° 50'
	2	2	3	1 $\bar{1}$ 0	21 $\bar{2}$	$\sqrt{32} : \sqrt{260} : \sqrt{260} = 1 : 2.850 : 2.850$	79° 54'
*	1	3	0	00 $\bar{1}$	$\bar{3}$ 10	$\sqrt{9} : \sqrt{224} : \sqrt{233} = 1 : 4.989 : 5.088$	90° 00'



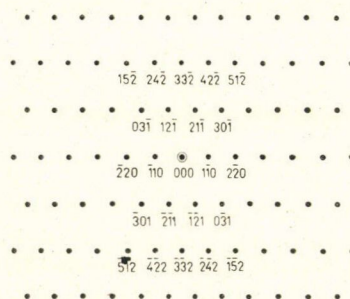
$$[111] \quad R_1:R_2:R_3 = 1:1:1$$



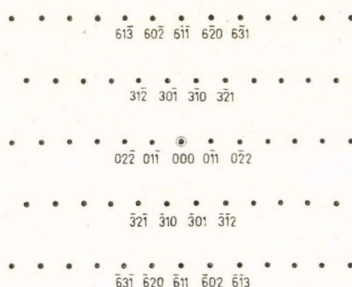
$$[001] \quad R_1:R_2:R_3 = 1:1:1.414$$



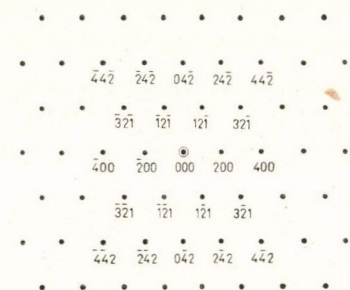
$$[011] \quad R_1:R_2:R_3 = 1:1.414:1.732$$



$$[113] \quad R_1:R_2:R_3 = 1:1.732:1.732$$



$$[133] \quad R_1:R_2:R_3 = 1:2.236:2.236$$



$$[012] \quad R_1:R_2:R_3 = 1:1.225:1.225$$

A tér-centrált köbös (b. c. c.) szerkezet tizenkét legsűrűbben betöltött reciprokrács-síkjának képe.

(Folytatás)

• • • • •
264 354 444 534 624

• • • • •
042 132 222 312 402

• • • • •
220 110 000 110 220

• • • • •
402 312 220 132 042

• • • • •
624 534 444 354 264

$$[112] \quad R_1:R_2:R_3 = 1:2.449:2.646$$

• • • • •
• 620 431 242 053 264
• 501 310 121 132 343
• 422 211 000 211 422
• 343 132 121 310 501
• 264 053 242 431 620
• • • • •

$$[135] \quad R_1:R_2:R_3 = 1:1:1.291$$

• • • • •
462 262 062 262 462
• • • • •
431 231 031 231 431
• • • • •
400 200 000 200 400
• • • • •
431 231 031 231 431
• • • • •
462 262 062 262 462

$$[013] \quad R_1:R_2:R_3 = 1:1.581:1.871$$

• • • • •
372 462 552 642 732

• • • • •
141 231 321 411

• • • • •
220 110 000 110 220

• • • • •
411 321 231 141

• • • • •

$$[115] \quad R_1:R_2:R_3 = 1:2.646:2.646$$

• • • • •
804 813 822 831 840

• • • • •
413 402 411 420 431

• • • • •
022 011 000 011 022

• • • • •
431 420 411 402 413

$$[122] \quad R_1:R_2:R_3 = 1:3:3.162$$

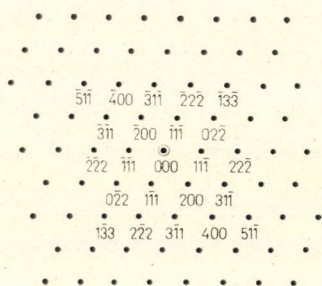
• • • • •
376 466 556 646 736

• • • • •
143 233 323 413

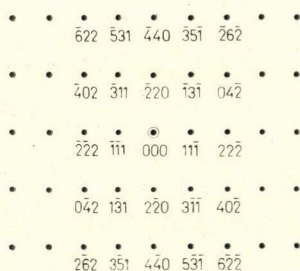
• • • • •
220 110 000 110 220

• • • • •
413 323 233 143

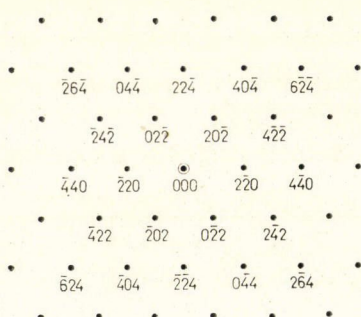
$$[335] \quad R_1:R_2:R_3 = 1:3.317:3.317$$



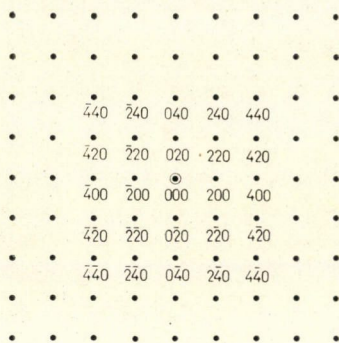
$$[011] \quad R_1:R_2:R_3 = 1:1:1.155$$



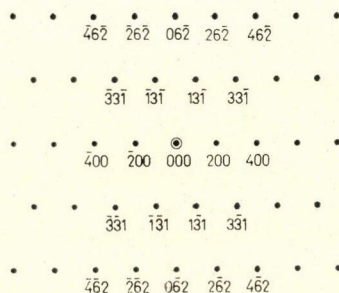
$$[112] \quad R_1:R_2:R_3 = 1:1.633:1.915$$



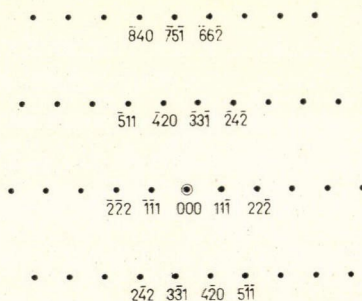
$$[111] \quad R_1:R_2:R_3 = 1:1:1$$



$$[001] \quad R_1:R_2:R_3 = 1:1:1.414$$



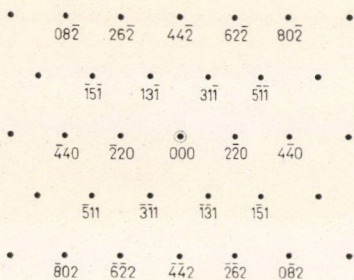
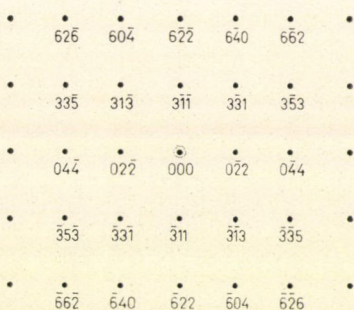
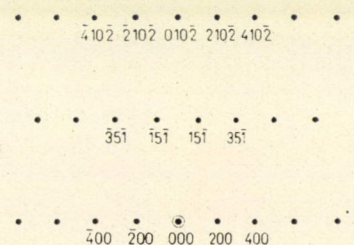
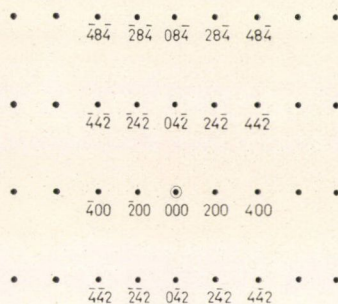
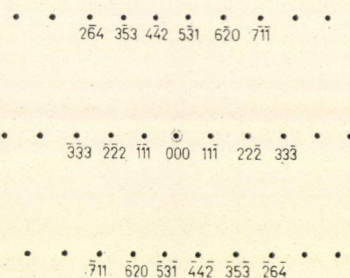
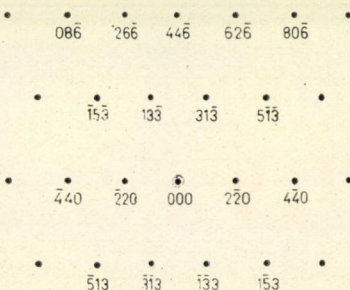
$$[013] \quad R_1:R_2:R_3 = 1:1.658:1.658$$

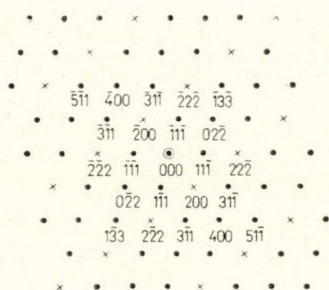


$$[123] \quad R_1:R_2:R_3 = 1:2.517:2.582$$

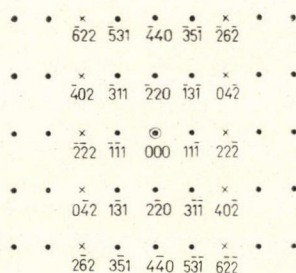
A lapcentrált köbös (f. c. c.) szerkezet tizenkét legsűrűbben betöltött reciprokrács-síkjának képe.

(Folytatás)

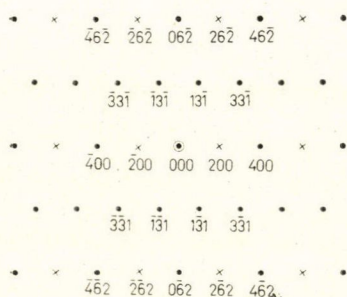
 $[114] \quad R_1 : R_2 : R_3 = 1 : 1.173 : 1.173$  $[233] \quad R_1 : R_2 : R_3 = 1 : 1.173 : 1.541$  $[015] \quad R_1 : R_2 : R_3 = 1 : 2.598 : 2.598$  $[012] \quad R_1 : R_2 : R_3 = 1 : 2.236 : 2.449$  $[134] \quad R_1 : R_2 : R_3 = 1 : 3.416 : 3.464$  $[334] \quad R_1 : R_2 : R_3 = 1 : 1.541 : 1.541$



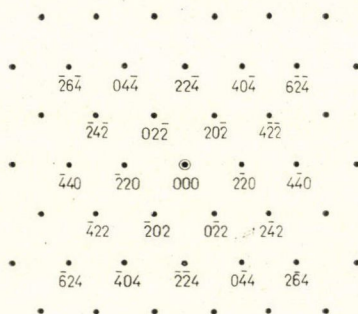
$$[011] \quad R_1 : R_2 : R_3 = 1 : 1 : 1.155$$



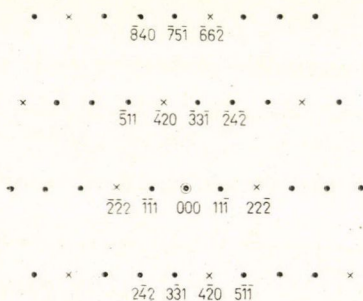
$$[112] \quad R_1 : R_2 : R_3 = 1 : 1.633 : 1.915$$



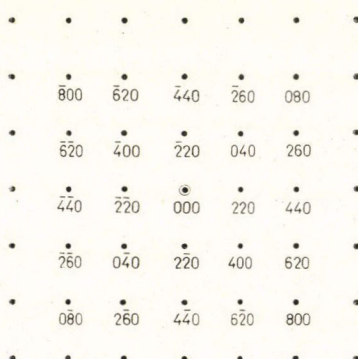
$$[013] \quad R_1 : R_2 : R_3 = 1 : 1.658 : 1.658$$



$$[111] \quad R_1 : R_2 : R_3 = 1 : 1 : 1$$



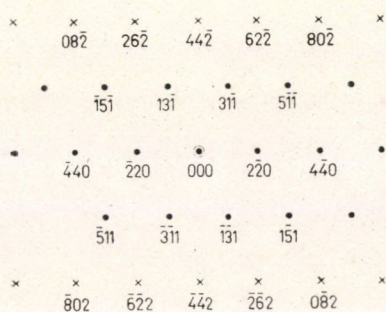
$$[123] \quad R_1 : R_2 : R_3 = 1 : 2.517 : 2.582$$



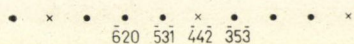
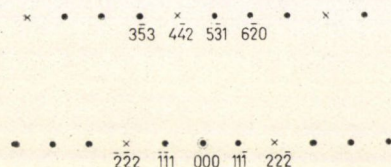
$$[001] \quad R_1 : R_2 : R_3 = 1 : 1 : 1.414$$

A gyémánt szerkezet tizenkét legsűrűbben betöltött reciprokrács-síkjának képe.

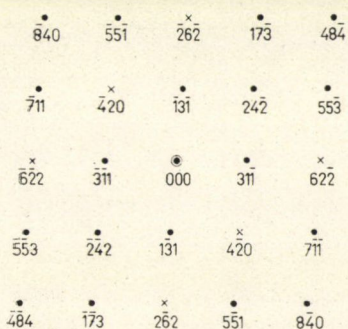
(Folytatás)



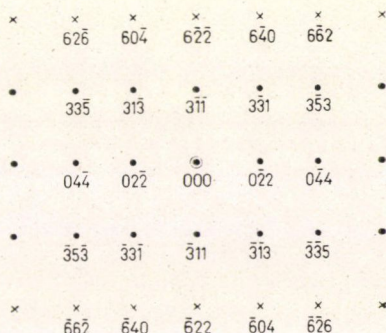
$$[114] \quad R_1 : R_2 : R_3 = 1 : 1.173 : 1.173$$



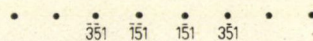
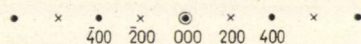
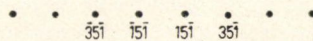
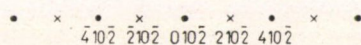
$$[\bar{1}\bar{3}\bar{4}] \quad R_1 : R_2 : R_3 = 1 : 3.416 : 3.464$$



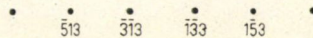
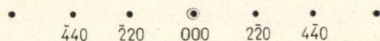
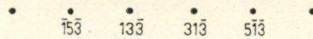
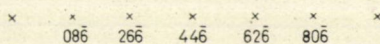
$$[125] \quad R_1 : R_2 : R_3 = 1 : 1 : 1.348$$



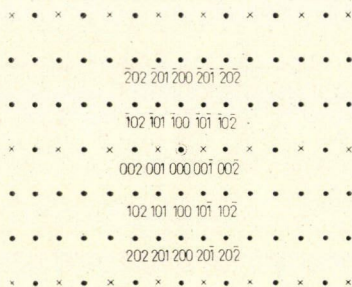
$$[233] \quad R_1 : R_2 : R_3 = 1 : 1.173 : 1.541$$



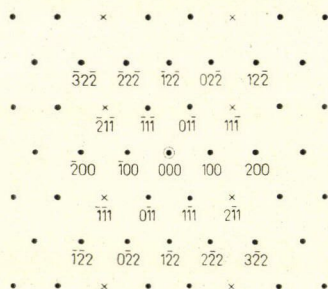
$$[015] \quad R_1 : R_2 : R_3 = 1 : 2.598 : 2.598$$



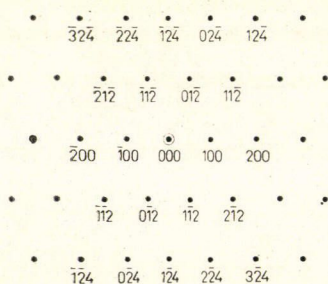
$$[334] \quad R_1 : R_2 : R_3 = 1 : 1.541 : 1.541$$



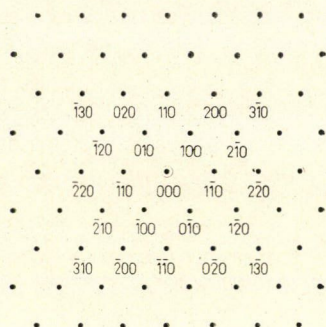
$$[010] \quad R_1:R_2:R_3 = 1:1.886:2.134$$



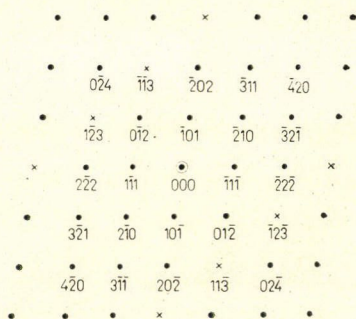
$$[011] \quad R_1:R_2:R_3 = 1:1.132:1.132$$



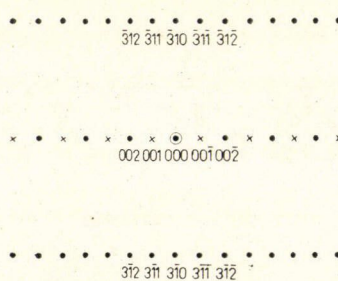
$$[021] \quad R_1:R_2:R_3 = 1:1.458:1.458$$



$$[001] \quad R_1:R_2:R_3 = 1:1:1$$



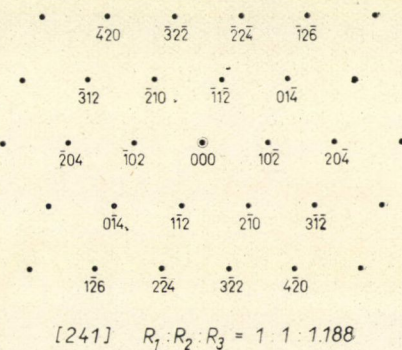
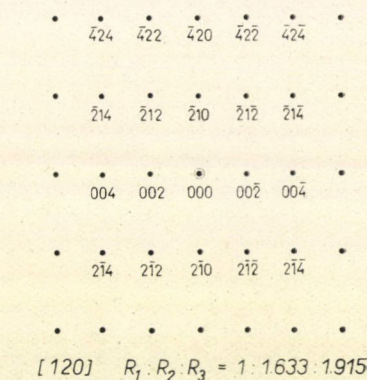
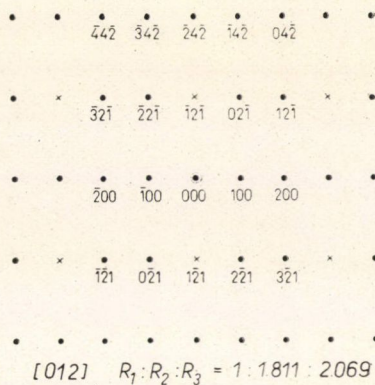
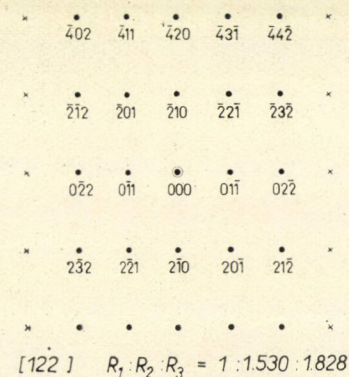
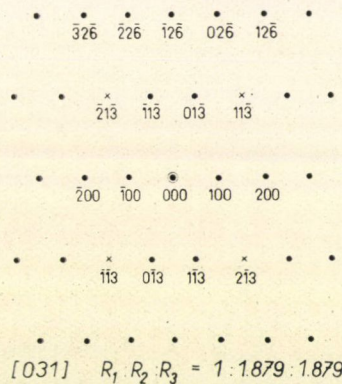
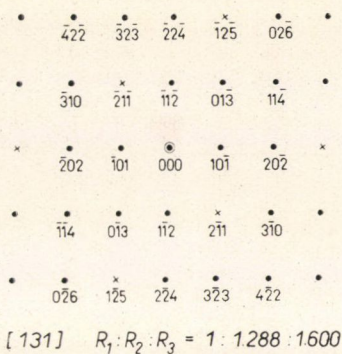
$$[121] \quad R_1:R_2:R_3 = 1:1:1.288$$



$$[130] \quad R_1:R_2:R_3 = 1:4.989:5.088$$

A hatszöges (h. p. c.) szerkezet tizenkét legsűrűbben betöltött
reciprokrács-síkjának képe.

(Folytatás)



kapjuk az $R_1:R_2:R_3$ arányra, amely a 2. táblázatban adott 18 reciprokrács-síkot foglal magába, ($\{1\ 4\ 11\}$ -től a $\{3\ 3\ 10\}$ -ig). Ezen rács-síkok legtöbbje azonban az ismert $L\lambda$ eszközkonstans alapján eliminálható: a (4) összefüggés szerint.

$$\sqrt{h_i^2 + k_i^2 + l_i^2} = R_i \frac{a}{L\lambda}$$

Helyettesítve itt a (10) összefüggést, a réz rácsparaméterét $a_{\text{Cu}} = 3,615 \text{ \AA}$ és $L = (14,2 \pm 0,3) \text{ mm \AA}$ azt kapjuk, hogy

$$\begin{aligned} \sqrt{h_1^2 + k_1^2 + l_1^2} &= \sqrt{3,27 \pm 0,40} \\ \sqrt{h_2^2 + k_2^2 + l_2^2} &= \sqrt{20,3 \pm 1,2} \\ \sqrt{h_3^2 + k_3^2 + l_3^2} &= \sqrt{21,7 \pm 1,2} \end{aligned} \quad (12)$$

A (12) összefüggés értékeiből mindenekelőtt következik, hogy a táblázat terjedelme elegendő az adott kép interpretációjához. (A 2. táblázat magábafoglal minden reciprokrács-síkot, amelyre

$$\sqrt{h_1^2 + k_1^2 + l_1^2}, \sqrt{h_2^2 + k_2^2 + l_2^2} \leq \sqrt{64}$$

lásd 4. pont).

A (12) összefüggésnek a 2. táblázat 4. oszlopában szereplő négyzetgyökök összehasonlításával azt kapjuk, hogy a 18 reciprokrács-síkból 16 eliminálható; csak a $\{0\ 1\ 2\}$ és az $\{1\ 2\ 3\}$ síkok rendelkeznek olyan négyzetgyökökkel a 4. oszlopban, amelyek a (12)-ben szereplő értékek bizonytalansági határa által meghatározott intervallumon belül esnek. (Most ismét a (12)-ben szereplő valószínű hibák 4,45-szerese veendő.) A $\{0\ 1\ 2\}$ - és az $\{1\ 2\ 3\}$ reciprokrács-síkokból az $\{1\ 2\ 3\}$ sík előnyben részesül, mert

(i) a (11) összefüggésnek megfelelő mért arány jobban egyezik az $\{1\ 2\ 3\}$ sík arányával, mint a $\{0\ 1\ 2\}$ síknál,

(ii) $\{0\ 1\ 2\}$ sík kétdimenziós rácsa derékszögű $\alpha = 90^\circ$, míg az 5. ábrán szereplő rácskép nyilvánvalóan nem derékszögű. Tehát egyértelműen következtethetünk arra, hogy az 5. ábra diffrakciós képe az *f. c. c.* szerkezet $\{1\ 2\ 3\}$ reciprokrács-síkjainak egyikét reprezentálja.

Köszönetnyilvánítás

A szerzők megköszönik Z. Kučerovának és J. Táborskának a táblázatok kiszámításában és elkészítésében nyújtott segítségét, valamint prof. V. Drahošnak és prof. M. Černohorský-nak a kézirat kritikai átvizsgálását. Megköszönik dr. A. Orlovának (Institute of Physical Metallurgy, Brno), hogy diffrakciós felvételeit rendelkezésükre bocsátotta.

IRODALOM

1. Komrska J., Peňáz D., Tables for Interpretation of Electron Diffraction Spot Patterns from Single-Parameter Crystals of Chemical Elements. Acta Sc. Nat. Brno, 4, 1—40, 1970.
2. de Jong W. F.: General Crystallography W. H. Freeman and Company, San Francisco 1959, 111.
3. Raether H., Elektroneninterferenzen. Handbuch der Physik, Bd. XXXII (ed. S. Flügge). Springer Verlag, Berlin 1957, 460.
4. Hirsch P. B. et al.: Electron Microscopy of Thin Crystals. Butterworths, London 1965, 94.

KÜLFÖLDI PUBLIKÁCIÓK

MTA KÖZPONTI FIZIKAI KUTATÓ INTÉZET, BUDAPEST 1968

HIGH, ENERGY PHYSICS AND COSMIC RAYS

1. Bozóki G.
Fenyves E.
Gémesy T.
Gombosi E.
Krasznovszky S.
Nagy E. et al.
On the 1350 MeV $A\gamma$ peak produced in $\pi^- - p$ interactions.
Phys. Letters, 28B, 360, 1968.
2. Nagy E. et al.
A measurement of the ratio of the decay rates $K_{L0} \rightarrow 2\gamma / K_{L0} \rightarrow 3\pi^0$.
Phys. Letters, 28B, 56, 1968.
3. Nagy E. et al.
A measurement of the branching ratio of the CP violating decay mode $K_L^0 \rightarrow 2\pi^0$. Phys. Letters, 28B, 215, 1968.
4. Nagy E. et al.
A measurement of the ratios of the rates $K_L^0 \rightarrow 3\pi^0 / K_L^0 \rightarrow \pi^+ \pi^- \pi^0$, $K_L^0 \rightarrow 3\pi^0 / K_L^0 \rightarrow$ all charged modes and $K_L^0 \rightarrow \pi \mu \nu / K_L^0 \rightarrow \pi e \nu$, and tests of the $\Delta I = 1/2$ rule. Nuovo Cim., 57A, 182, 1968.
5. Perjés Z.
A method for constructing certain axially-symmetric Einstein-Maxwell fields. Nuovo Cim., 55B, 600, 1968.
6. Somogyi A.
Válas Gy.
Varga A.
Remark on the energy determination of high energy nucleons by means of absorption calorimeter.
Canadian J. of Phys., 46, S1107, 1968.
7. Surányi P.
Marx Gy.
Semi-strong C violation with $\Delta I = 3$.
Nuovo Cim., 54A, 856, 1968.
8. Surányi P.
Domokos G.
Families of Regge trajectories at nonvanishing energy I.
Nuovo Cim., 56A, 445, 1968.
9. Surányi P.
Domokos G.
Families of Regge trajectories at nonvanishing energy II.
Nuovo Cim., 57A, 813, 1968.
10. Surányi P.
Domokos G.
Domokosné Kövesi Zs.
Mass formula in broken $SL_{2,C}$ and its application to the nucleon and delta Regge trajectories.
Nuovo Cim., 56A, 233, 1968.
11. Tóth K.
Electric dipole operators and mixed representations in $U/3 \otimes U/3$.
Nucl. Phys., B4, 450, 1968.
12. Ádám A.
Deák F.
Jéki L.
Kiss A.
Kövesy Zs.
Pálka G.
Hraskó P.
Об аномальном рассеянии вперед нейтронов с энергией 14 MeV на уране.
(On the forward scattering anomaly of 14 MeV neutrons in uranium.)
Jadernaja Fiz., 8, 439, 1968.
13. Beregi P.
Lovas I.
Isobaric analogue resonances in nuclei of closed neutron shells.
Nucl. Phys., A111, 289, 1968.
14. Borbély I.
Dolinszky E. I.
Об эффектах тождественности частиц в ядерных реакциях.
(On particle identity effects in nuclear reactions.)
Jadernaja Fiz., 7, 554, 1968.
15. Borbély I.
Dolinszky E. I.
Turovcev V. V.
Периферийная модель прямых ядерных реакций.
(Peripheral model of direct nuclear reactions.)
Jadernaja Fiz., 8, 492, 1968.

16. Cser L.
Dézi I.
Keszthelyi L.
Gladkih I.
Kulgawczuk D.
Eissa N. A.
Serk E.
Mössbauer study of hyperfine fields in Mn—Zn ferrites.
Phys. Stat. Solidi, 27, 131, 1968.
17. Demeter I.
Keszthelyi L.
Varga L.
Zámori Z.
Szökefalvi-Nagy Z.
g-factor of Coulomb excited states of nuclei in alloys.
Hyperfine Structure and Nuclear Radiations ed by E. Matthias
and D. A. Shirley, North-Holland, Publ. Comp. 1968., 192. old.
18. Demeter I.
Keszthelyi L.
Varga L.
Szökefalvi-Nagy Z.
Zámori Z.
The *g*-factor of the 320 keV state of ^{51}V measured by Coulomb
excitation in Fe—V alloy.
Nucl. Phys., A120, 540, 1968.
19. Dézi I.
Keszthelyi L.
Gladkih I.
Cser L.
Kulgawczuk D.
Nabil E.
Mössbauer study of hyperfine fields in Mn—Zn ferrites.
Hyperfine Structure and Nuclear radiations ed by North-
Holland Publ. Comp. 1968., 520. old.
20. Dézi I.
Vértes A.
Komor M.
The pH dependence of Mössbauer spectra measured in frozen
ferric perchlorate solutions.
Inorg. Nucl. Chem. Letters, 4, 649, 1968.
21. Dézi I.
Eissa N. A.
Keszthelyi L.
Molnár B.
Nagy D. L.
Mössbauer study of SnCl_2 and $\text{Dy}(\text{ClO}_4)_3$ in ice.
Phys. Stat. Solidi, 30, 215, 1968.
22. Erő J.
Czibók T.
Dolinszky T.
Hrehuss G.
(d, p) reactions on nitrogen and silicon isotopes.
Proceedings of the Second Conference on Nuclear Reactions
with Light Nuclei and Nuclear Structure, Rossendorf 1968.
117—118 pp.
23. Fodor I.
Demeter I.
Keszthelyi L.
Szentpétery I.
Szökefalvi-Nagy Z.
Szűcs J.
Varga L.
Zimányi J.
 γ -ray spectra of analogue resonances in the $^{48}\text{Ti}(p, \gamma)^{49}\text{V}$
reaction.
Nucl. Phys., A116, 167, 1968.
24. Györgyi G.
Kövesy Zs.—Domokos.
On Schwinger's angular-momentum calculus and the Dirac
bracket.
Nuovo Cim., 58B, 191, 1968.
25. Györgyi G.
Kepler's equation, Fock variables, Bacry's generators and
Dirac brackets.
Nuovo Cim., 53A, 717, 1968.
26. Györgyi G.
Kepler's equation, Fock variables Bacry's generators. II. Clas-
sical and quantum-group dynamics of the Kepler problem.
IPNO—TH 135, 1968.
27. Kluge Gy.
Lajtai A.
Average number and energy of prompt neutrons from fission.
Phys. Letters, 27B, 65, 1968.
28. Lovas I.
Intermediate structure of cross-sections. Proceedings of the
Second Conference on Nuclear Reactions with Light Nuclei
and Nuclear Structure, Rossendorf 1968. 1—10 pp.
29. Lovas I.
Révai J.
An exactly soluble model of the resonance scattering.
J. I. N. R. report Dubna, 1968.

30. Nagy L.
Nagy T.
Vinnay I.
31. Pócs L.
Keszthelyi L.
Dézsi I.
Molnár B.
32. Vályi L.
33. Zimányi J.
Gyarmati B.
34. Zimányi J.
Gyarmati B.
- Измерение относительной вероятности тройного деления U—233, U—235, U—238 и T—232.
Jadernaja Fiz., 8, 443, 1968.
- Investigation of condensed aqueous systems by Mössbauer effect.
Hyperfine Structure and Nuclear Radiations ed by E. Matthias and D. A.
Shirley, North-Holland Publ. Comp. 1968., 566. p.
A source of polarized proton and deuterom beams.
Nucl. Instr. and Meth. 58, 21, 1968.
Charge-exchange in the (*d, p*) stripping reaction.
Phys. Letters, 27B, 120, 1968.
Shape of the nuclear symmetry potential.
Phys. Rev., 174, 1112, 1968.

PHYSICAL OPTICS

35. Bakos J.
Szigeti J.
36. Csillag L.
Jánossy M.
Salamon T.
37. Csillag L.
Jánossy M.
Náray Zs.
Salamon T.
38. Farkas Gy.
Kertész I.
Náray Zs.
39. Varga P.
40. Varga P.
Kryukov P. G.
Kuprisov V. F.
Szenatszkij U. V.
- Measurements of cross-section for collision of second kind in helium.
J. of Phys. B, 1, 1115, 1968.
Side light investigations on a 6328 Å He—Ne gas laser.
Phys. Letters, 26A, 436, 1968.
- Investigation of photoelectric effect at very low light intensities.
Phys. Letters, 27A, 343, 1968.
- Discrimination of laser induced non-linear photoeffect from thermionic emission by time response measurements.
Phys. Letters, 28A, 190, 1968.
- Многokратное индуцированное рассеяние электронов мощным полем ОКГ.
(Multiple electron scattering induced by a strong laser generator field.)
ZSETF, 55, 336, 1968.
- Генерация инфракрасного излучения с помощью полиметилового красителя, применяемого в ОКГ. на неодимовом стекле.
(Generation of infrared radiation with the help of polymethylic dyes used in laser generators on neodymium glass.)
ZSETF, Piszma v. Redakcija, 8, 501, 1968.

SOLID STATE PHYSICS

41. Balla J.
Tompá K.
Tóth F.
42. Bata L.
Kroó N.
43. Bollók L.
Lévai F.
Pellionisz P.
Szabó F.
Szigeti B.
Szlávik F.
Zobor E.
- Gas stream temperature control device for temperatures from —195 to 250 °C.
Cryogenics, 8, 48, 1968.
- Investigation of the dynamical properties of liquid-gas systems by coherent cold neutron scattering near the critical point. Proceedings of the Fourth IAEA Symposium on Neutron Inelastic Scattering, Copenhagen, Vol. 1. 615, 1968.
- Instrumentierung und Steuersystem des Atomreaktors ZR-4. Atompraxis, 14, 243, 1968.

44. Cser L.
Dézi I.
Gladkih I.
Keszthelyi L.
Kulgawczuk D.
Eissa N. A.
Sterk E.
Mössbauer study of hyperfine fields in Mn—Zn ferrites.
Phys. Stat. Solidi, 27, 131, 1968.
45. Dézi I.
Eissa N. A.
Keszthelyi L.
Molnár B.
Nagy D. L.
Mössbauer study of SnCl_2 and $\text{Dy}(\text{ClO}_4)_3$ in ice.
Phys. Stat. Solidi, 30, 215, 1968.
46. Ferrel R. A.
Menyhárd N. et al.
Fluctuations and lambda phase transition in liquid helium.
Annals of Physics, 47, 565, 1968.
47. Gordon J.
Kroó N.
Orbán G.
Pál L.
Pellionisz P.
Szlávik F.
Vizi I.
Correlation type time-of-flight spectrometer with magnetically pulsed polarized neutrons.
Phys. Letters, 26A, 122, 1968.
48. Gordon J.
Kisdiné Koszó É.
Pál L.
Vizi I.
Neutron scattering investigations of the dynamics of critical state in iron.
Proceedings of the Fourth IAEA Symposium on Neutron Inelastic Scattering, Copenhagen, Vol. 2, 55, 1968.
49. Krén E.
Nagy E.
Nagy L.
Pál L.
Szabó P.
Structures and phase transformations in the Mn—Ni system near equiatomic concentration.
J. Phys. Chem. Solids, 29, 101, 1968.
50. Krén E.
Szabó P.
Pál L.
Tarnóczy T.
Kádár G.
Hargitai Cs.
X-ray and susceptibility study of the first-order magnetic transformation in Mn_3Pt .
J. Appl. Phys., 39, 469, 1968.
51. Krén E.
Kádár G.
Szabó P.
Effect of Fe substitution on the magnetic structure of Mn_3Pt .
Phys. Letters, 26A, 556, 1968.
52. Krén E.
Kádár G.
Pál L.
Sólyom J.
Szabó P.
Tarnóczy T.
Magnetic structures and exchange interactions in the Mn—Pt system.
Phys. Rev., 171, 574, 1968.
53. Kroó N.
Pál L.
Inelastic scattering of neutrons by virtual magnon states in dilute alloys. J. Appl. Phys., 39, 453, 1968.
54. Kroó N.
Pál L.
Jovicz D.
Virtual magnon states in dilute alloys.
Proceedings of the Fourth IAEA Symposium on Neutron Inelastic Scattering, Copenhagen, Vol. 2, 37, 1968.
55. Kroó N.
Bata L.
Spin-waves around the Néel-temperature in MnO
Proceedings of the Fourth IAEA Symposium on Neutron Inelastic Scattering, Copenhagen, Vol. 2, 111, 1968.
56. Pál L.
Krén E.
Kádár G.
Szabó P.
Tarnóczy T.
Magnetic structures and phase transformations in Mn based CuAu—I type alloys. J. Appl. Phys., 39, 538, 1968.
57. Pál L.
Kroó N.
Correlation type time-of-flight spectrometer with magnetically chopped polarized neutron beam.

- Pellionisz P.
Szlávik F.
Vizi I.
58. Pikalev É. M.
Szavcsenko M. A.
Sólyom J.
59. Sólyom J.
60. Sólyom J.
61. Sólyom J.
Zawadowski A.
62. Sólyom J.
Zawadowski A.
63. Sólyom J.
Zawadowski A.
64. Sólyom J.
Zawadowski A.
65. Tóth J.
66. Vasvári B.
Berényi D.
Varga D.
Brücker E.
67. Zawadowski A.
- Proceedings of the Fourth IAEA Symposium on Neutron Inelastic Scattering, Copenhagen, 2, 407, 1968.
- Термодинамика и корреляционные функции геизенберговского антиферромагнетика.
(Thermodynamics and correlation functions of the Heisenberg — antiferromagnetism.)
ZSETF, 55, 1404, 1968.
- Спиновые волны и термодинамические величины в одноосном анизотропном антиферромагнетике.
(Spin-waves and thermodynamic values in single axis, anisotropic antiferromagnetism.)
ZSETF, 55, 2355, 1968.
- A proof of Wick's theorem for spin operators.
Phys. Letters, 28A, 99, 1968.
- On the theory of anomalous tunneling due to paramagnetic impurities.
J. Appl. Phys., 39, 705, 1968.
- On the specific heat of dilute magnetic alloys.
Phys. Stat. Solidi, 25, 473, 1968.
- Theory of zero bias anomalies due to paramagnetic impurities I. General formulation of the theory.
Phys. of Condensed Matter, 7, 325, 1968.
- Theory of zero bias anomalies due to paramagnetic impurities II. Application of the theory.
Phys. of Condensed Matter, 7, 342, 1968.
- The temperature dependence of resistivity in Al—Ta dilute alloys.
Phys. Stat. Solidi, 27K, 47, 1968.
- An upper limit for the positron decay of ^{54}Mn .
Nucl. Phys., A106, 248, 1968.
- Влияние примесей на явления типа сверхпроводимости в одномерной системе.
(Influence of contaminants on superconduction type phenomena in unidimensional systems.)
ZSETF, 54, 1429, 1968.

NUCLEAR AND ANALYTICAL CHEMISTRY

68. Berei K.
Vasáros L.
69. Birkenshaw K.
Masson A. J.
Hyatt D.
Matus L.
Opauszky I.
Henelman M. J.
70. Jancsó G.
Kiss I.
71. Molnár F.
Horváth A.
Khalkin V. A.
72. Molnár F.
Lebegyev N. A.
- Die Reaktionen von heißen ^{38}Cl -Atomen in Gemischen von Tetrachlorkohlenstoff mit aromatischen Verbindungen.
Isotopenpraxis, 4, 19, 1968.
- The use of multiple pulse techniques to study ion-neutral processes.
Advances in Mass-Spectrometry 4, 379, 1968.
- Neuere Ergebnisse bei der gaschromatographischen Deuterierung organischer Verbindungen.
Isotopenpraxis, 4, 220, 1968.
- Anion exchange behaviour of cerium sub-group rare earths in aqueousmethanol solutions of neutral nitrates.
IVth International Symposium on Chromatography and Electrophoresis, Presses Academiques Européennes, Bruxelles, 1968.
- Получение нейтронодефицитных изотопов редкоземельных элементов.

- (Production of neutron-deficient rare earth isotopes.)
EAI-report 6-3955, Dubna, 1968.
73. Schiller R. Self-trapping of radiation produced electrons.
Nature, 217, 1141, 1968.
 74. Schiller R. Pulse radiolitic investigation of AgCl formation and precipitation.
Intern. J. Radiat. Phys. Chem., 1 (1968).
Измерение температур в новой активной зоне венгерского исследовательского реактора.
(Temperature measurement in the new active zone of the Hungarian experimental reactor.)
Conference on reactors, Warszawa, 1968.
 75. Bod L.
Várkonyi L.
Vizdos G.
Gácsi L.
Szaklajda L.
76. Bollók L.
Lévai F.
Pellionisz P.
Szabó F.
Szigeti B.
Szlávik F.
Zobor E.
77. Bollók L.
Lévai F.
78. Élő S.
Pallagi D.
79. Gyimesi Z.
Valkó J.
80. Makra Zs.
Vértés P.
81. Makra Zs.
Tóth M.
82. Pellionisz P.
Szlávik F.
83. Szabó F.
Bollók L.
Frankl L.
Muzsnay L.
Németh A.
Szatmáry Z.
Szép L.
Szlávik F.
Turi L.
Valkó J.
Vigassy J.
Zobor E.
84. Szatmáry Z.
Valkó J.
Vértés P.
85. Szatmáry Z.
Turi L.
86. Szlávik F.
Garamszegi L.
Kozmann G.
Lévai L.
Pellionisz P.
Szigeti B.
- Instrumentierung und Steuersystem des Atomreaktors ZR-4.
Atompraxis, 14, 243, 1968.
- Some special units for control and safety systems of a zero power reactor.
Conference on reactors, Warszawa, 1968.
- Some newer modifications in the control system of the reactor type VVRSz-M, Budapest.
Investigation of the dynamic properties of the critical assembly ZR-4.
Conference on reactors, Warszawa, 1968.
- Neutron transmission through multilayer shields.
Conference on reactors, Warszawa, 1968.
- Мощность доз нейтронов и гамма-лучей в окрестности биологической защиты реактора ВВР—СМ.
(Neutron and gamma ray dose rates in the environment of the biological radiation protection of the VVR-SzM reactor.)
Conference on reactors, Warszawa, 1968.
- A novel, fully digital, real-time auto- and cross-correlator.
Conference on reactors, Warszawa, 1968.
- The zero power reactor ZR-4.
Conference on reactors, Warszawa, 1968.
- Status report on reactor physics calculations.
Conference on reactors, Warszawa, 1968.
- Determination of β_{eff} by method of statistical weights and by measuring the absolute power of the reactor.
Conference on reactors, Warszawa, 1968.
- A modular system of fully transistorized measuring apparatus for processing signals from neutron detectors.
Conference on reactors, Warszawa, 1968.

87. Várkonyi L.
Balogh S.
Tóth M.
Frankl L.
Czikó R.
88. Vértés P.
89. Vértés P.
90. Vértés P.
Vigassy J.
91. Zobor E.
Bollók L.
92. Zobor E.
Bollók L.
- Отчет о годовичной работе будапештского реактора типа BBP—СМ.
(Account on the first year operation of the VVR-SzM reactor in Budapest.)
Conference on reactors, Warszawa, 1968.
Application of albedo method to deep penetration calculation (Code TRAM).
Conference on reactors, Warszawa, 1968.
Calculation of multigroup reflexion and transmission matrices by solving non-linear matrix differential equations.
Conference on reactors, Warszawa, 1968.
Note on the albedo criticality equation.
Nukleonik, 10, 334, 1968.
A self-checking reactor safety and interlock system.
Atomkernenergie, 13, 377, 1968.
Some safety and reliability considerations about the self-checking safety and interlock system of the ZR-4 zero power reactor.
Conference on reactors, Warszawa, 1968.

ELECTRONICS, INSTRUMENTS AND ENGINEERING

93. Binder Gy.
94. Nagy Á. Z.
Vértés P.
95. Törő F.
Láng I.
Fefilov B. V.
Cselnokov L. P.
Szanyi L.
- Röntgenometer, ein therapeutisches Dosimeter mit Szintillations-Messkopf.
Röntgenblätter 21. 68. Nr. 4.
Correction for dry bulk density in measurements with neutron moisture gauges.
J. of Sci. Instr. Series 2, 1, 1097, 1968.
Ассоциативный анализ с использованием внешней памяти АУ—2048.
(Associative analysis by the application of AY-2048 external memories.)
J. I. N. R. report. Dubna, 1968.

SZERZŐ INDEX 1968

1969

HIGH ENERGY PHYSICS AND COSMIC RAYS

1. Anzon Z. V.*
Nagy E. et al.
2. Betev B.*
Sztanév T.
Válas G.
3. Bozóki G.
Fenyves E.
Gombosi E.
Nagy E.
Surányi G.
Telbisz F.
Vesztergombi G.
- Общие характеристики пион-нуклеонных взаимодействий в ядерной эмульсии при энергии 45 и 60 Гев.
Vseszoj. Konf. po Koszm. Lucs., Leningrád, 1969.
Спектр плотности проникающей компоненты широких атмосферных ливней.
(Density spectrum of the penetrating component of extensive air showers.)
Известия АН Szer. Fiz., 33, 1529, 1969.
Determination of the K_s decay branching ratio.
Phys. Letters, 30B, 498, 1969.

* nem tagjai az Intézetnek.

4. Bozóki G.
Gombosi É.
Posch M.
Vanicsek L.*
5. Daneljan L. S.*
Efimov B. V.*
Sotnikov S. K.*
Kardon B.
Kiss D.
Seres Z.
Szabó Z.
6. Koch J.
Somogyi A.
Wagner I.
Válas G.
Varga A.
7. Montvay I.*
Vesztergombi G.
8. Perjés Z.
- On the multiplicity distribution of high-energy pion nucleon and nucleon-nucleon interactions beyond 1 GeV.
Nuovo Cim., 64A, 881, 1969.
- Study of gamma-ray spectra for 163-Dy/n, $\gamma/164$ Dy reaction of neutron resonance capture.
Proc. of Intern. Symp. on Neutron Gamma-Ray Spectroscopy, Studsvik, 1969.
- Система обработки данных мезонных телескопов.
Известия АН Szer. Fiz., 33, 1930, 1969.
- $\pi\pi$ scattering, current algebra and the Virasoro model.
ITP-Bp. Report, No. 266, 1969. okt.
3-dimensional „relativity” for axisymmetric stationary space-times.
Commun. in Mathem. Physics., 12, 275, 1969.
An introduction into the higher symmetries of Regge-poles.
Fortschritte der Physik, 17, 167, 1969.
- Investigation of the $M(\pi^+\pi^-)$ effective mass spectrum.
Phys. Lettets, 29B, 518, 1969.
Search for the neutral decays $\omega^0 \rightarrow \mu\gamma$ and $\omega^0 \rightarrow \eta^0\pi^+\pi^-$.
Phys. Letters, 29B, 532, 1969.
Lorentz poles at zero energy in the unequal-mass scattering amplitude IC/1969/104.
Some results on SL (2, c) representations. IC/69, Internal report.

NUCLEAR PHYSICS

14. Androszenko H. D.*
Ermacsambetov Sz. B.*
Kovács I. et al.
15. Bencze G.
Szentpétery I.
16. Berecz Gy.
Kostka P.
17. Biri J.
Somlai L.
Szani L.
Kardon B.
Seres Z.
Zámori Z.
18. Borob'eva V. G.*
D'jancsenko P. P.*
Lajtai A. et al.
- Угловая анизотропия и структура барьера деления.
(Fission barrier structure and angle anisotropy.)
Proc. of the Second Symp. on Phys. and Chem. of Fission.
Vienna, 1969. p. 419. Preprint FEI. 1969. p. 185.
Breakup correction to the deuteron optical potencial.
Phys. Letters, 30B, 446, 1969.
- Исследование коронирующего триода электростатического ускорителя.
Р. Т. Е. 1969, 3. 24.
- Задачи универсальной малой вычислительной машины ТРА в системе измерения и накопления данных.
„ТРА” v sziszteme izmerenija dannih. Rabotü mezsdunardnogo szeminara po jadernoj elektronike. Várna, Dubna. 1969
- Распределение осколков по массам и кинетическим энергиям при делении ядер быстрыми нейтронами.
(Mass and kinetic energy distribution of fragments in nuclear fission by fast neutrons.)
Proc. of the Second Symp. on Phys. and Chem. of Fission.
Vienna, 1969. p. 923 (abstract).
Dynamical effects on ^{181}Ta nuclei in ice.
Chemical Phys. Letters, 4, 229, 1969.
19. Cameron J. A.*
Gardner P. R.*
Keszthelyi L.
Prestwich W. V.

20. Czibók T.
Hrehuss G.
Kovács I.
Nagy L.
Vinnay I.
Measurements on the differential cross section of $n-p$ scattering below 3 MeV.
Phys. Letters, 29B, 105, 1969.
21. Dézsi I.,
Balázs A.
Molnár B.
Gorobchenko V. D.*
Lukashevich I. I.*
Mössbauer study of phtalocyanineiron (II) and phtalocyaninechloroiron down to 4.8 °K.
J. of Inorg. Nucl. Chem., 31, 1661, 1969.
22. D'jacsenko P. P.*
Kuz'minov B. D.*
Lajtai A.
Кинетическая энергия осколков и энергетический баланс при делении ^{235}U нейтронами энергий в интервале 0—0,6 Мэв.
Proc. of the Second Symp. on Phys. and Chem. of Fission. Vienna, 169 p. 955 (abstract).
Спектр гамма-лучей, возникающих при захвате тепловых нейтронов ядром серы.
(Thermal neutron capture gamma ray studies of natural sulphur.)
Izvestija AN Szer. Fiz., 33, 1259, 1969.
23. Egri S.
Kardon B.
Pócs L.
Seres Z.
Zámori Z.
Kepler's equation, Fock variables, Bacry's generators. II.: Classical and quantum group dynamics of the Kepler problem.
Nuovo Cim., 62A, 449, 1969.
24. Györgyi G.
On the equality of the matrix elements M_V^2 , M_A^2 , M_P^2 , in muon capture.
Phys. Letters, 28B, 470, 1969.
25. Hráskó P.
Oscillations in the energy dependence of the $n-p$ scattering cross section.
Phys. Letters, 28B, 585, 1969.
26. Hrehuss G.
Czibók T.
Angular distribution of gamma rays from the fission of ^{235}U induced by 14 MeV neutrons.
Proc. of the Second Symp. on Phys. and Chem. of Fission, Vienna, 1969 p. 561.
27. Jéki L.
Kluge G.
Lajtai A.
Study of gamma-ray spectra from the $^{163}\text{Dy}/n$, $\gamma/^{164}\text{Dy}$ reaction on neutron resonance capture. Neutron capture gamma-ray spectroscopy.
IAEA Vienna, 1969/663.
28. Kardon B.
Kiss D.
Seres Z.
Szabó L.
Daneljan L. Sz.*
Efimov B. V.*
Sztotnikov Sz. K.*
Измерения временной корреляции с помощью ЦВМ типатра.
„TPA” Rabotü mezsdunarodnogo szeminara po jadernoj elektronike. Várna, Dubna, 1969.
29. Kardon B.
Seres Z.
Zámori Z.
Biri J.
Somlai L.
Измерение изомерных отношений сечений на изотопах Хе.
Jadern. Fizika, 10, 27, 1969.
30. Kardon B.
Zámori Z.
Seres Z.
Gróz P.
Измерение средней множественности в реакциях (n, γ) , вызванных тепловыми нейтронами.
Jadern. Fiz., 10, 907, 1969.
31. Kecskeméti J.
Kiss D.
Nuclear g -factors of three levels of ^{192}Pt .
Canadian J. of Phys., 47, 2395, 1969.
32. Kenyon D. B.*
Keszthelyi L.
Cameron J. A.*
Scintillation response function and decay time of CsI(Na) to charged particles. Nucl. Instr. and Meth., 68, 9, 1969.
33. Keszthelyi-Lándori S.*
Hrehuss G.
Calculation of angular and energy distribution of prompt neutrons from fission.
34. Kluge G.

35. Kluge G.
Lajtai A.
Proc. of the Second Symp. on Phys. and Chem. of Fission. Vienna, 1969. p. 927 (abstract).
On the average characteristics of prompt neutron emission from fission.
Phys. Letters, 30B, 311, 1969.
36. Kovács I.
Nagy L.
Nagy T.
Vinnay I.
Angular anisotropy of fragments from ternary fission of ^{235}U , ^{238}U .
Proc. of the Second Symp. on Phys. and Chem. of Fission. Vienna, 1969 p. 890 (abstract).
37. Seres Z.
Szabó L.
Sztotnikov Sz. K.*
Danelján L. Sz.*
Kardon B.
Zámori Z.
Системы стабилизации спектрометра гамма-лучей.
Kurcsatov Intézet, Moszkva, 1969.
38. Varga L.
Demeter I.
Keszthelyi L.
Pócs L.
Szökefalvi-Nagy Z.
Anomalous hyperfine field at recoiled Rh nuclei of low energy in $\text{Fe}_{51,5}\text{Rh}_{48,5}$ alloy.
Phys. Letters, 29A, 171, 1969.
39. Varga L.
Demeter I.
Keszthelyi L.
Szökefalvi-Nagy Z.
Zámori Z.
g-factors of the 210 keV and 240 keV states of ^{195}Pt .
Phys. Rev., 177, 1783, 1969.
40. Varga L.
Koicki S.*
Perturbed $\alpha-\gamma$ angular correlation study of internal fields acting on recoil implanted ^{208}Tl in iron.
Phys. Letters, 30A, 312, 1969.

PHYSICAL OPTICS

41. Csillag L.
Jánossy M.
Generation of laser pulses by a rotating mirror system.
Optics Technology, 1, 97 (1969).
42. Dudenkova A. V.*
Zaharov J. P.*
Kiss G. M.
Nikitin V. V.
Szemjonov A. Sz.*
Излучательные характеристики ОКГ с различной ориентацией перехода относительно полоса роста.
(Radiation characteristics of injection lasers with variously oriented $p-n$ junction relative to the crystal growth front.)
FIAN Preprint, No. 66, 1969.
43. Grasiuk A. Z.*
Mulikov V. F.*
Csillag L.
Times stretching and shaping of the ruby laser giant pulses using stimulated Raman scattering.
Nuovo Cim., 64B, (2) 300, 1969.
44. Jánossy M.
Náray Z.
Investigation on the possibility of light energy accumulation in the process of photoelectric effect.
Phys. Letters, 29A, 479, 1969.
45. Mester E.*
Juhász J.*
Varga P.
Karika G.*
Contribution à l'application chirurgique des lasers. (Contribution to the surgical application of lasers.)
Extrait de Lyon Chirurgical, 65, 335, 1969.
46. Varga P.
Krjukov P. G.*
Kuprisov V. F.*
Szenatzkij Ju. V.*
Генерация полиметилового красителя, применяемого в лазере на неодимовом стекле.
Optika i Spektroszkopija, 26, 1006, 1969.

SOLID STATE PHYSICS

47. Fazekas P.
Zawadowski A.
The role of many particle intermediate states in the formation of the Abrikosov-Shul resonance.
Phys. Letters, 28A, 669, 1969.

48. Grüner G. Charge density oscillations in dilute Fe—Al alloys.
Sol. State Commun., 7, 1421, 1969.
49. Grüner G. Tompa K. Tóth F. NMR studies of molecular motions in compounds with three carbon rings.
Phys. Stat. Solidi, 32, K71, 1969.
50. Hargitai C. The role of the electronic mean free path in magnetic resistive anomalies.
Sol. State Commun., 7, 1367, 1969.
51. Hargitai C. Corradi G.* On the contribution to the electronic specific heat due to nearly magnetic impurities.
Sol. State Commun., 7, 1535, 1969.
52. Jánossy A. Grüner G. Tompa K. PMR studies of frozen aqueous FeCl₂ solutions.
J. of Chem. Phys., 51, 5189, 1969.
53. Konczos G. Nagy D. Osztanovics Ju. M.* Pál L. Cser L. Исследование распределения алюминия в сплаве.
Szoobscsenija OIJaI, P14—4828, 1969.
54. Krén E. Kádár G. Crystal and magnetic structures in the Mn—Pd system near MnPd₃.
Phys. Letters, 29A, 340, 1969.
55. Novikov G. V.* Cser L. et al. Магнитные поля на ядрах олова в замещенном кикелевом феррите.
(Magnetic fields on tin nuclei in substituted nickel ferrite.)
ZSETF, 56, 743, 1969.
56. Pál L. Kroó N. Aric M.* Jovic D.* Virtual spin-wave state below and above the Curie-temperature in a dilute Fe(Cr) alloy.
Phys. Letters, 28A, 213, 1968.
57. Sólyom J. Zawadowski A. Theory of electron-electron interaction and superconductivity in dilute magnetic alloys above the Kondo temperature.
Zeitschr. für Physik, 226, 116, 1969.
58. Tompa K. Grüner G. Jánossy A. Tóth F. First order quadrupole effect in dilute copper-based Cu—Zn alloys.
Sol. State Commun., 7, 697, 1969.
59. Tompa K. Tóth F. Grüner G. NMR investigation of dilute Al—Ta alloys.
Sol. State Commun., 7, 51, 1969.
60. Tompa K. Tóth F. Nagy E. Copper-63 NMR in elastically deformed copper foils.
Sol. State Commun., 7, 47, 1969.
61. Vincze I. Cser L. Mössbauer spectra of Fe—Ga alloys.
Phys. Stat. Solidi, 35, K25, 1969.
62. Zawadowski A. Fazekas P. Dynamics of impurity spin above the Kondo temperature I. Calculation of the spin propagator and the static susceptibility. Zeitschr. für Physik, 226, 235, 1969.

NUCLEAR AND ANALITICAL CHEMISTRY

63. Akhmadzhanov A. I.* Broda R.* Molnár J. et al. Life-time measurement of excited states in Re-182.
Preprint JINR, E6-4311, Dubna, 1969.
64. Akhmadzhanov A. I.* Broda R.* Molnár J. et al. О схеме распада Os-182 (On the decay scheme of the Os-182).
Preprint JINR, 6-4471, Dubna, 1969.
65. Akhmadzhanov A. I.* Broda R.* Molnár J. et al. Схемы распада Os-183 и Os-183m. (Decay schemes of Os-183 and Os-183m. Preprint JINR, 6-4746, Dubna 1969.

66. Belevszkij V. N.
Zádor E. et al.
О неравномерности распределения стабилизированных атомов Н в облученных замороженных водных растворах кислот
Him. Vüsz. Energ., 3, 421, 1969.
67. Csajka M.
Lavruhina A. K.*
Szabó E.
68. Elek A.
Csóke A.
Szabó E.
Simonits A.
Kertész K.
69. Hegyháti M.
70. Jákli Gy.
Illy J.-né
Организация активационно-аналитической приреакторной лаборатории и ее оборудование в КФКИ.
Naucsno-tehncseszkaja konferencija po apparature dlja aktivacionnogo analiza, 1969, p. 214.
71. Kardón B.
Zámori Z.
Seres Z.
Gróz P.
DPPH free radical in MO—LCAO approximation.
J. of Chem. Phys., 50, 3123, 1969.
72. Kiss I.
Gróz P.
Révész A.
Sipos T.
D-Isotopieeffekte im Dampfdruck von einigen nicht assoziierenden organischen Verbindungen. (D-isotope effects in vapour pressure of some nonassociating organic compounds.)
Isotope Titles, GDR, 1969.
73. Kósa Somogyi I.
Измерение изомерных отношений сечений на изотопах Хе.
(Measurement of cross section isomer ratios on Xe isotopes.)
Jadern. Fizika, 10, 27, 1969.
- 74.a Molnár F.
Production of ^{125}I from pile-irradiated xenon difluoride.
J. of Inorg. Nucl. Chem., 31, 1225, 1969.
- 74.b Molnár F.
Lebedev N. A.*
Ionic process in gamma-irradiated organic glasses.
Proc. of 9th Japan Conf. on Radioisotopes, p. 588, 1969.
75. Molnár F.
Lebedev N. A.*
Micro-chromatographic separation of rare earth elements.
Proc. of 2nd Int. Symp. on Ion Exchange, p. 303 1969.
76. Quittner P.
Концентрирование примесей редкоземельных элементов при анализе элементов цериевой подгруппы методом анионообменной хроматографии.
Zs. Anal. Him., 24, 8, 152, 1969.
77. Quittner P.
Concentration of all rare earth impurities of cerium sub-group rare earth matrices. J. of Radioanalyt. Chem., 2, 91, 1969.
78. Quittner P.
Wainerdi R. E.*
Peak area determination for Ge(Li) detector data.
Nucl. Instr. and Meth., 76, 115, 1969.
79. Rausch H.
Salamon A.
Precise peak area determination for Ge(Li) detectors.
Anal. Chem., 41, 1504, 1969.
80. Schiller R.
Least squares resolutions of gamma-ray spectra resulting from interfering radioactivities.
Nucl. Instr. and Meth., 74, 33, 1969.
81. Schiller R.
Ebert M.*
Activation analysis of manganese in GaAs, GaP and GaAsP semiconductors.
J. of Radioanal. Chem., 3, 265, 1969.
82. Simonits A.
Bogács J.
Quittner P.
Szabó E.
The early stages of radiation produced charge carriers.
Current Topics in Radiation Research, Vol. VI. North Holland Publ. Co. 1969.
83. Watterich A.*
Gécs M.
Voszka R.*
Pulse radiolysis study of silver chloride formation and precipitation.
Int. J. Rad. Phys. Chem., 1, 111, 1969.

Применение полупроводниковых детекторов в активационном анализе без химического разложения.
Naucsno-tehncseszkaja konferencija po apparature dlja aktivacionnogo analiza, 1969, p. 238.

ESR studies of V-centres in $\text{NaCl}(\text{Ca}^{++})$ crystals.
Phys. Stat. Sol. 31, 571, 1969.

84. Zahn H.*
Jákli Gy. et al. Massenspektrometrische Isotopenanalyse an kleinen Probenmengen mit Aluminiumoxid als Substanzträger, 2. Mitteilung. Isotopenpraxis, 5, 116, 1969.

REACTOR PHYSICS AND TECHNICS

85. Bod L.
Radak B.* An absolute dosimetric calibration of VK-3 and VK-7 experimental holes of the RA reactor with the use of calorimeters. Bull. of the Boris Kidric Inst. of Nucl. Sci. Vol. 20. Chemistry, No. 2, 1969.
86. Gyimesi Z. Practice of reactivity measurement at Central Research Institute for Physics, Budapest. IAEA-108 Technical Report, Vienna, 1969.
87. Gyimesi Z.
Szatmáry Z.
Mogilner A. I. et al.* Сопоставление точечной и пространственной моделей кинетики в уран-гидридном реакторе. (Comparisan of point- and space model kinetics in uranium hydride reactors.) FEI-177, 1969.
88. Kosály G.
Szatmáry Z. On a new method for the determination of kinetic parameters in absolute units. Nukleonik, 12, 243, 1969.
89. Kosály G.
Valkó J. Remarks on the calculation of slow-neutron cross section and thermal spectra in water. Nukleonik, 12, 237, 1969.
90. Szabados L. Analytical investigation of crossflow mixing between opened reactor channels. CNEN, RT/ING/69/2 Roma, 1969.
91. Szabados L. Pressure drop measurements in single and two phase flow. CNEN, Doc. Pr. Pu (69) 21.
92. Szatmáry Z.
Turi L. Determination of β_{eff} by the method of statistical weights and by measuring the absolute power of the reactor. Nukleonik, 12, 241, 1969.
93. Szatmáry Z.
Valkó J. An on-line spectral analysis of reactor noise. Nukleonik, 12, 208, 1969.
94. Turi L.
Williams M. M. R.* Neutron flux perturbations in foils. J. of Nucl. Energy, 23, 49, 1969.
95. Vértes P. Methods for albedo matrix calculation. Nukleonik, 12, 67, 1969.
96. Vértes P. Reactor cell calculation by Albedo method. Nukleonik, 12, 276, 1969.
97. Zobor E. Predicting the reliability of „Two-out-of-Three” logic systems with self-checking and repair. (IAEA) PL-372 (28).
98. Zobor E. Some aspects of computer application to reactor operation and control. (IAEA) PL-379 (27).
99. Zobor E. Status report on the application of computers for reactor operation and control. (IAEA) PL-379 (9).

HEALTH PHYSICS

100. Andrási A.
Fehér I. ^{137}Cs burdens in the adult population of Budapest. Kernenergie, 12, 134 1969.

ELECTRONICS

101. Reho J. Development of wired program computers, their utilization in nuclear measurement technics and future trends of their development in the Central Research Institute for Physics. EAI, Dubna, 1969.

102. Rosta J. Über eine Erweiterung des Cayleyschen Satzes. (On an extension of the Cayley theorem.)
Mathem. Nachrichten, 41, 223 1969.
103. Törő F. Checking equipment for the output and input data channels of the analyser type AI-4096-3.
Szoobscsenija OIJaI, 11-4342, Dubna.
104. Végh E. Error probability of information protected by Hagelbarger code.
Teleinformatique, Paris, 1969.

SZERZŐK INDEXE 1970

1970

HIGH ENERGY PHYSICS AND COSMIC RAYS

1. Anzon, Z. V.*
Bozóki Gy.
Fenyves E.
Gombosi É.
Nagy E. et al.
Coherent production of particles by 60 GeV/c pions on emulsion nuclei.
Proc. XI. Int. Conf. on Cosmic Rays, Budapest 1969.
Phys. Letters, 31B, 241, 1970.
2. Anzon, Z. V.*
Bozóki Gy.
Fenyves E.
Gombosi É.
Nagy E. et al.
General characteristics of π^- nucleon interactions at 60 GeV/c obtained in nuclear emulsion.
Phys. Letters, 31B, 237, 1970.
3. Aszejkin, V. Sz.*
Benkő Gy.
Danilova, T. V.*
Kabanova, N. V.*
Nikolszkij, Sz. I.*
Sztamenov, J. N.*
Флуктуации числа μ -мезонов и зависимость числа мезонов от числа частиц в ливнях на уровне гор.
(Fluctuations of the number of μ -mesons and dependence of the number of mesons on the number of particles in air showers at mountain level.)
Izv. Akad. Nauk SzSzsZr Szer. Fiz., 34, 1955, 1970.
4. Benkő Gy.
Orbadajev, B. B.*
Sztamenov J. N.*
Угловое распределение ШАЛ на уровне гор.
(Angular distribution of extensive air showers at mountain level.)
Trudü vszeszozjuznoj konferencii po fizike koszmiceszkih lucsei, Leningrád NIIYAF MGU. 1970, preprint.
Study of the di-pion in the mass values region $M(\pi^0\pi^0)$.
Nuclear Phys., 24B, 358, 1970.
5. Fenyves E.
Gémesy T.
Krasznovszky S.
Pintér Gy.
Strugalski Z. S.*
 C violation in η -decay?
Nuclear Phys., B15, 429, 1970.
- 5a Frenkel A.
Vesztergombi Gy.
Marx Gy.*
Study of the effective mass spectra of the $\gamma\gamma$, $\pi^0\gamma$, $\pi^0\gamma\gamma$, $\pi^0\pi^0$, $\pi^0\pi$, $\pi^0\pi^0\gamma$, $\pi^0\pi^0\pi^0$ systems in the mass value region $M|\gamma\dots\gamma| \leq 1.3$ GeV.
Preprint, Dubna El-5349.
6. Gémesy T.
Krasznovszky S.
Pintér Gy. wet al.
Neutral decay modes of the η^0 particle.
Preprint, Dubna, El-5256-1970.
7. Gémesy T.
Krasznovszky S.
Pintér Gy.
Strugalski Z. S.*

* nem tagjai az Intézetnek.

8. Kiss D.
Kardon B.
Seres Z.
Gamma-gamma angular-correlation measurements in the $^{59}\text{Co}(n, \gamma)^{60}\text{Co}$ reaction.
Proc. Conf. on Angular Correlation in Nucl. Desintegrations, Delft, 1970. aug.
9. Kiss D.
Waddington J. C.*
Hagemann K. A.*
Ogaza S.*
Herskind B.*
Deutsch B. I.*
Time-dependent interactions on rare-earth ions implanted into copper lattices. Nuclear Reactions Induced by Heavy Ions, North-Holland p. 438, 1970.
10. Montvay I.
Vesztergombi Gy.
 $\pi\pi$ scattering, current algebra and the Virasoro model.
Lettere al Nuovo Cim., 3, 77, 1970.
11. Perjés Z.
Spinor treatment of stationary space-times.
J. of Math. Phys. New York, 11, 3383, 1970.
12. Szegő K.
Tóth K.
On the introduction of Lorentz poles into the unequal-mass scattering amplitude.
Nuovo Cim., 66A, 371, 1970.
13. Tóth K.
Lorentz poles at zero energy in the unequal-mass scattering amplitude.
Nuovo Cim., 66A, 323, 1970.

NUCLEAR PHYSICS

14. Artukh A. G.*
Avdeichikov, V. V.*
Erő J.
Gridnev G. F.*
Mikhcheev V. L.*
Volkov V. V.*
Identification of charged particles by combination of the magnetic analyses and the $\Delta E, E$ method.
Nuclear Instrum. Methods, 83, 72, 1970.
15. Artukh A. G.*
Avdeichikov V. V.*
Erő J.
Gridnev G. F.*
Mikhcheev V. L.*
Volkov V. V.*
Wilczynski J.*
Evidence for particle instability of ^{13}Be and ^{14}Be .
Phys. Letters, 33B, 407, 1970.
Preprint OIAI, E7-5325, 1970.
16. Artukh A. G.*
Avdeichikov V. V.*
Erő J.
Gridnev G. F.*
Mikhcheev V. L.*
Volkov V. V.*
Wilczynski J.*
On some regularities in multi-nucleon transfer reactions with heavy ions.
Preprint OIAI E7-5241, 1970.
17. Artukh A. G.*
Avdeichikov V. V.*
Erő J.
Gridnev G. F.*
Mikhcheev V. L.*
Volkov V. V.*
Wilczynski J.*
Neutron-rich isotopes of light elements produced in transfer reactions with heavy ions.
Preprint OIAI E7-5319, 1970.
18. Cameron J. A.*
Gibb A. W.*
Kenyon D. B.*
Keszthelyi L.
Transient magnetic field in $\text{Fe}_{515}\text{Rh}_{48.5}$ alloy.
Phys. Rev. Letters, 24, 468, 1970.
19. Dyachenko P. P.*
Kuzminov B. D.*
Lajtai A.
The kinetic energy of fragments in the fission of ^{235}U by neutrons with energies from 0 to 0.6 MeV.
Phys. Letters, 31B, 122, 1970.
20. Fodor I.
Continuum contribution to the particle unstable states.
Phys. Letters, 31B, 336, 1970.

21. Jéki L.
Kluge Gy.
Lajtai A.
Угловое распределение гамма-излучения, сопровождающего деление ^{232}Th , ^{233}U , ^{235}U , ^{238}U нейтронами с энергией 14 мэв.
XX. Ezsegodnoe szovescsanie po jadernoj spektroskopii i sztrukture a tomnovo jadra, Leningrad, 1970. jan. Leningrad, p. 80. 1970.
22. Jéki L.
Kluge Gy.
Kozma Gy.
Lajtai A.
Dyachenko P. P.*
Kuzminov B. D.
Fission neutron spectrum from 0.01 to 1,0 MeV.
Preprint, IAEA CN-26/4.
Proc. of Second International Conference on Nuclear Data for Reactors (Helsinki, 1970. jun.)
IAEA, Vienna, Vol. II. p. 87, 1970.
23. Vályi L.
Investigation of a source of He^{++} ions.
Nuclear Instrum. Methods, 79, 315, 1970.
24. Vorobjova V. G.*
Dyachenko P. P.*
Kolozov N. P.*
Kuzminov B. D.*
Szergacsov A. I.*
Szmirenkina L. D.*
Lajtai A.
Анализ зависимости от энергии нейтронов на основе энергетического баланса при делении ядер.
Preprint, IAEA CN-26/88.
Proc. of Second International Conference of Nuclear Data for Reactors (Helsinki, 1970. jun.)
IAEA, Vienna, Vol. II. p. 177, 1970.

PHYSICAL OPTICS

25. Arszlonbekov T. A.*
Bakos J.
Kántor J.
Kiss Á.
Nagajeva M.*
Многостронняя ионизация из метастабильных состояний атома гелия.
(Multiphoton ionization of helium atoms in the metastable state.)
Vszeszojuznoe szovescsanie po nelinejnoj optiki, Kisinyov, 1970.
26. Bakos J.
Kántor J.
Автоматически управляемый лазер в режиме модулирования добротности с вращающейся призмой.
(Automatic control of lasers operating by quality modulation with a rotating prism.)
Preprint FIAN, 1970.
27. Bakos J.
Kántor J.
Kiss Á.
Трехфотонная ионизация атома гелия, находящегося в возбужденном состоянии.
(Three-photon ionization of helium atoms in the 2S excited state.)
Pisz'ma ZsETF, 12, 371, 1970.
28. Bakos J.
Kántor J.
Kiss Á.
Наблюдение трехфотонной ионизации атома гелия, находящегося в возбужденном состоянии.
(Observation of the three-photon ionization of helium atoms in the metastable 2S excited state.)
Kratkoe Szobscs. po Fiz. 10, 1970.
29. Bakos J.
Kántor J.
Kiss Á.
Зондовый метод регистрации ионов, созданный лазерным излучением в плазме после свечения разряда.
(A probe method of recording ions produced by laser radiation in the afterglow plasma.)
Preprint FIAN, 122, 1970.
30. Bakos J.
Zon B. A.*
Delone G. A.*
Delone N. B.*
Kántor J.
Kiss Á.
Manakov N. L.*
Rapoport L. P.*
Многофотонные процессы при взаимодействии с электромагнитным полем оптической чистоты.
(Multiphoton processes in the interaction of atomic systems with electromagnetic fields of optical frequency.)
VI. Quantum Electronic Conference, Kyoto, 1970.

31. Csillag L.
Jánossy M.
Salamon T.
Time delay of laser oscillation on the Green transitions of a pulsed He—Cd laser.
Phys. Letters, 31A, 532, 1970.
32. Csillag L.
Jánossy M.
Kántor K.
Rózsa K.
Salamon T.
Investigation on a continuous wave 4415 Å cadmium ion laser.
J. of Phys. D, Applied Phys., 3, 64, 1970.
- 32.a Farkas Gy.
Roof prism output coupler for gigawatt laser pulses.
Optics and Laser Technology, 2, 204, 1970.
33. Farkas Gy.
Horváth Z. Gy.
Two-photon photoelectric effect of Cs₃Sb cathode produced by high intensity picosecond laser pulses.
Phys. Status Solidi (a), 3, K 29, 1970.
34. Kertész I.
Konamkov E. A.*
Krjukov P. G.*
Szenatszkij Ju. V.*
Csekalin Sz. V.*
Влияние двойного лучепреломления возникающего в Nd-стекле при накачке, на работу лазера.
(Effect on laser performance of double light refraction in Nd-glass during pumping.)
ZSETF, 59, 1115, 1970.
35. Rózsa K.
Salamon T.
Low-noise He—Ne laser.
Optics and Laser Technology, 2, 151, 1970.

SOLID STATE PHYSICS

36. Bata L.
Jovic D.
The molecular dynamics along the coexistence curve of a liquid-gas system.
Phys. Letters, 33A, 287, 1970.
37. Cser L.
Dézsi I.
Nagy D. L.
Конференция по применениям эффекта Мессбауэра, Тихань, Венгрия (17—21 YI 1969 г.)
(Conference on applications of the Mössbauereffect, Tihany, Hungary (17—21—VI. 1969).
Uszpehi Fiz. Nauk, 101, 343, 1970.
38. Cser L.
Goncharov G. N.*
Tomilov S. B.*
Ostanevich Jn. M.*
Mössbauer effect in the FeS_{1+x} system.
Phys. Status Solidi, 37, 141, 1970.
39. Cser L.
Ostanevich Yu. M.*
Pál L.
Mössbauer investigation of the magnetic field effect on the ordering process in Fe₃Al.
Phys. Status Solidi, 42, K147, 1970.
40. Cser L.
Vincze I.
Nagy D. L.
Additional zero-point spin deviation due to a non-magnetic impurity in α -Fe₂O₃.
Phys. Status Solidi, 37, K51, 1970.
41. Fazekas P.
Zawadowski A.
Temperature dependence of renormalized exchange coupling constant in the Kondo effect.
J. Appl. Phys., 41, 1155, 1970.
42. Kádár G.
Krén E.
Neutron diffraction study of Mn₃Ga.
Solid State Commun. 8, 1653, 1970.
43. Kovács Gy.
Bánó I.*
Simó W.*
Einzelne Fragen über Flugeigenschaften der Seegelflugzeugen.
(Some questions of the flight properties of gliders.)
Schweitzer Aerorevue, 5/6, 1970.
44. Krén E.
Kádár G.
Pál L.
Effect of atomic ordering on the magnetic structure of MnPd₃ phase.
J. Appl. Phys., 41, 941, 1970.
45. Kroó N.
Zsigmond G.
Deme S.
Horváth I.
Synchronized chopper time-of-flight spectrometer at the Dubna Pulsed Reactor.
Preprint, Dubna 1970.
46. Menyhárd N.
Range of validity of the Landau theory in the $H \neq 0$ case.
Solid State Commun., 8, 1337, 1970.
47. Menyhárd N.
Effect of the s - d interaction on spin-lattice relaxation.

- Sólyom J.
Zawadowski A.
48. Mezei F.
Zawadowski A.
49. Nagy I.
Pál L.
50. Pál L.
Tarnóczy T.
Konczos G.
51. Pardavi-Horváth M.
Vonokurova L.*
52. Solt G.
Brovman E. G.*
53. Solt G.
Janik J.*
Otnes K.*
Kosály G.
54. Sólyom J.
55. Tompa K.
Tóth F.
Nagy E.
56. Zawadowski A.
Ruvalds J.*
57. Zawadowski A.
Ruvalds J.*
58. Zawadowski A.
Ruvalds J.*
- Phys. Rev., 1970.
- Kinematic change in the conduction electron density of states due to impurity scattering.
Phys. Rev. 1970.
- Electrical resistivity and thermoelectric power of Ni near the Curie point.
Phys. Rev. Letters, 24, 894, 1970.
- Magnetic susceptibility anomaly in nearly equiatomic Mn—Ni alloys.
Phys. Status Solidi, 42, 49, 1970.
- On the pressure dependence of the magnetic transitions in a Fe—Rh alloy.
Phys. Status Solidi, 41, K5, 1970.
- Role of three-body forces in the dynamical properties of white tin.
Solid State Commun., 8, 903, 1970.
- Lattice vibrations and molecular rotation in solid methane near the melting point.
Motions in Molecular Crystals, ed. by The Faraday Society, 1970.
- The effect of $s-d$ exchange interaction on the nuclear spin relaxation in dilute alloys.
Z. Physik, 238, 195, 1970.
- ^{63}Cu NMR in elastically deformed copper foils of cubic texture.
Phys. Status Solidi, 41, 413, 1970.
- Theory of structure in the superfluid helium spectrum considering roton-roton resonances.
Phys. Rev. Letters, 25, 333, 1970.
- Indirect coupling and antiresonance of two optic phonons.
Phys. Rev. Letters, 24, 1111, 1970.
- Two-phonon resonances and hybridization of the resonance with single-phonon states.
Phys. Rev. 2B, 1172, 1970.

NUCLEAR AND ANALITICAL CHEMISTRY

59. Bakos L.
Döge H. G.*
Fodor M.
Pokó Z.
60. Bugajenko L. T.*
Zádor E.
Belevszkij V. N.*
Golubjev V. B.*
61. Elek A.
Bogács J.
Szabó E.
62. Erdey L.*
Gimesi O.*
Szabó E.
Csajka M.
63. Gimesi O.*
Bányai É.*
Csajka M.
Szabadhazy A.*
64. Hegyháti M.
- Derivatographic analysis of peroxomolybdic acids.
Proc. of III. Anal. Conf. Budapest, Vol. 1. p. 291, 1970.
- Изотопный эффект при радиолизе замороженных водных растворов кислот.
(Isotope effects in the radiolysis of frozen aqueous solutions of acids.)
Him. Vüsz. Energ., 5, 468, 1970.
- Substoichiometry for multielement separation by metal chelate extraction. I. Principle and Theory.
J. Radional. Chem., 4, 281, 1970.
- Determination of contaminants in hydrogenation catalyses by neutron activation analysis.
Talanta, 1970.
- Separation of trace quantity of metal ions by heterogeneous isotope exchange.
Talanta, 1970.
- Charge-transfer model for hydrolysis of acetylcholine.
J. Chem. Phys., 52, 2775, 1970.

65. Hegyháti M.
Farkas M.*
Pullman's „Dipositive Ester-Bond Fission” principle: studies of acetylcholine by extended Hückel method.
J. Chem Phys., 52, 2778, 1970.
66. Illy H.
Jákly Gy.
Convenient labelling method for normalizing of ^{18}O enriched water on gaschromatographic column.
J. of Labelled Compounds, 1970.
67. Jancsó G.
Németh G.
Gellai B.
Application of the minimax approximation to the evaluation of the specific heat of crystals.
Chem. Phys. Letters, 7, 314, 1970.
68. Jancsó G.
Pupezin J.*
Van Hook A.*
The vapour pressure of ice between $+10^{-2}$ and -10^{+2} .
J. Phys. Chem., 74, 2984, 1970.
69. Jancsó G.
Pupezin J.*
Van Hook A.*
Vapour pressure of H_2^{18}O ice (1) (-17°C to 0°C) and H_2^{18}O water (0°C to 16°C).
Nature, 225, 723, 1970.
- 69.a Kuzin V. I.*
Nefedov V. D.*
Norszejev J. V.*
Toropova M. A.*
Halkin V. A.*
Gróz P.
Изучение химических изменений при процессах электронного захвата ^{125}Xe в некоторых неорганических системах. (Study of chemical variations in electron capture processes by ^{125}Xe in some inorganic systems.)
Radiohimija, 12, 137, 1970.
70. Matus L.
Opauszky I.
Определение отношения D/H на масс-спектрометре MI—1305 при помощи модулированного ускоряющего напряжения.
(Determination of the D/H ratio with the MI-1305 mass-spectrometer using modulated accelerating voltages.)
Prib. i Tehn. Eksz., 1970. évf. 5. sz. 241. old.
71. Molnár J.
Исследование уровней ^{176}Hf при распаде ^{176}Ta .
(Study of ^{176}Hf -levels in the decay of ^{176}Ta .)
Preprint OIAI p6-5094, Dubna, 1970.
72. Nagy G. Á.
Kiss I.
Molnár F.
Production of isotopes by secondary nuclear reactions.
Manual of Radioisotope Production, 2nd Edition, IAEA, Vienna, 1970.
73. Opauszky I.
Matus L.
Determination of $^{18}\text{O}/^{16}\text{O}$ ratio in precipitation.
IAEA Progress Report, 1970.
74. Orbán É.*
Ördögh M.
Szabó E.
Miskovits G.*
Dubai M.*
Analysis of silicon, aluminium and phosphorus in biological samples by neutron activation and spectrophotometry.
Biochem. Medicine, 3, 221, 1970.
75. Ördögh M.
Csath G.
Szabó E.
Neutron activation analysis of impurities in thorium and zirconium matrices.
J. Radioanal. Chem. 1970.
76. Pupezin J.*
Jancsó G.
Van Hook A.*
The vapour pressure of water: a good reference system?
J. Chem. Ed. 1970.
77. Pupezin J.*
Jancsó G.
Taylor J. W.*
Van Hook W. A.*
A system for determinations of precise isotopic vapour pressure differences from -20 to 110°C , including temperature control to 0.001 over that range.
Isotopenpraxis, 6, 319, 1970.
78. Quittner P.
Szabó E.
Perneczki G.
Major A.*
Determination of short-lived radionuclides in neutron-activated human head-hair samples.
J. Radioanal. Chem., 5, 133, 1970.
79. Salamon A.
Activation analysis of gallium in tungsten.
J. Radioanal. Chem., 4, 81, 1970.
80. Schiller R.
The dielectric constant of dipolar substances in the environment of ions produced by irradiation.
Chem. Phys. Letters, 5, 176, 1970.

81. Schiller R. The time-dependence of the dielectric constant. Proc. 2nd L. H. Gray Memorial Symp. 1969 Phys. Soc. Ed., London, 1970. p. 8.
82. Tölgyessy Gy.*
Salamon A.
Szabó E. Aktivacna analiza nabitými tsasticami.
(Activation analysis with charged particles.)
Chem. Listy, 1970.

REACTOR PHYSICS AND TECHNICS

83. Bod L. Measurements with the Hungarian heat-flow calorimeter. IAEA-128, 24—30, 1970.
84. Muzsnay L.
Próbáld V.
Bollók L.
Zobor E. Entwicklung von Havarieschutz- und Stabstellungsanzeigern für Kernreaktoren im Zentralen Forschungsinstitut für Physik. (Development of safety and control servo-mechanisms and reactor control rod position indicators at the Central Research Institute for Physics.)
Kernenergie, 13, 360, 1970.
85. Szabó Z. Pulsed neutron source for reactor physics.
Nuclear Instrum. Methods., 78, 199, 1970.

HEALTH PHYSICS

86. Békés E.
Fehér I.
Deme S.
Suha Z.* A thermoluminescent glass dosimeter.
Aktuelle Strahlenschutzprobleme, ÖSV, Wien, p. 206, 1970.
87. Bíró J.
Fehér I. Исследование тритиевых загрязнений в окружении нейтронных генераторов.
„Dozimetrija i fizika zascsitü na uszkoriteljah” No. 16—4888, Dubna 1970. p. 129.
88. Bíró J.
Fehér I. Investigation of tritide aerosols by use of personal aerosol sampler.
Aktuelle Strahlenschutzprobleme, ÖSV, Wien, p. 256, 1970.
89. Bozóky L.*
Fehér I. Innere Strahlenbelastung — Strahlenschutzprobleme. (Problems of internal radiation burdens and radiation protection.)
Aktuelle Strahlenschutzprobleme, ÖSV, Wien, p. 223, 1970.
90. Deme S. On neutron dosimetry by semiconductor detectors and hydro-genous radiator assembly.
Health Phys., 18, 705, 1970.
91. Makra Zs. Development of measurement techniques in the field of radiation protection.
Aktuelle Strahlenschutzprobleme, ÖSV, Wien, p. 163, 1970.
92. Makra Zs. Некоторые вопросы дозиметрии нейтронов широкого энергетического диапазона.
(Some questions in the dosimetry of neutrons with a wide energy range.)
Dozimetrija izlucsenij i fizika zascsitü uszkoritelej zarjazsonnüh csasztic, Dubna, 1970, p. 191.
93. Makra Zs.
Vértés P. Об энергетическом спектре нейтронов, проходящих через защиту, состоящую из различных материалов.
(Spectra of neutrons after penetrating shields of various composition.)
Problemü zascsitü ot pronikajuscsih izlucsenij reaktornüh usztanovok. Tom. 2. p. 91. SzEV, Melekessz.
94. Makra Zs.
Vértés P. Расчеты энергетических спектров нейтронов, проходящих через различные слои, и применение полученных результатов в дозиметрии нейтронов.
Dozimetrija izlucsenij i fizika zascsitü uszkoritelej zarjazsonnüh csasztic. Dubna, 1970, p. 29.

FUNDAMENTAL THEORETICAL PROBLEMS

95. Jánossy L. A new approach to the theory of relativity.
 96. Király P. Rate of energy loss and sea-level spectrum of muons above 1000 GeV.
 Wolfendale A. W.* Phys. Letters, 32B, 510, 1970.
 97. Király P. Background effects in the search for quarks.
 Wolfendale A. W.* Phys. Letters, 31B, 410, 1970.

COMPUTING TECHNIQS

98. Gyarmati B. Single particle resonant-state wave functions in a simple description of isobaric analog resonances.
 Vertse T. Phys. Rev. C, 1, (No. 1.) p. 1, 1970.
 Zimányi J.
 Zimányi M.

SZERZŐ INDEX 1968

- Ádám A. 12
 Bakos J. 35
 Balla J. 41
 Balogh, S. 87
 Bata, L. 42, 55
 Beregi P. 13
 Berei K. 68
 Berényi D.* 66
 Binder Gy. 93
 Birkenshaw K.* 69
 Bod L. 75
 Bollók L. 43, 76, 77, 83, 91, 92
 Borbély I. 14, 15
 Bozók Gy. 1
 Brücker E.* 66
 Cselnokov L. P.* 95
 Cser L. 16, 19, 44
 Csillag L. 36, 37
 Czibók T. 22
 Czikó R. 87
 Deák F. 12
 Demeter I. 17, 18, 23
 Dézsi I. 16, 19, 20, 21, 31, 44, 45
 Dolinszky E. I. 14, 15
 Dolinszky T. 22
 Domokos G. 8, 9, 10
 Domokosné Kövesi Zs. 10
 Eissa N. A.* 16, 21, 44, 45
 Élő S. 78
 Erő J. 22
 Farkas Gy. 38
 Fefilov B. V.* 95
 Fenyves E. 1
 Ferrel R. A.* 46
 Fodor I. 23
 Frankl L. 83, 87
 Gácsi L.* 75
 Garamszegi L. 86
 Gémesy T. 1
 Gladkih I. 16, 19, 44
 Gyarmati B.* 33, 34
 Gyimesi Z. 79
 Györgyi G. 24, 25, 26
 Hargitai Cs. 50
 Henelman, M. J.* 69
 Horváth A.* 71
 Hraskó P. 12
 Hrehuss G. 22
 Hyatt D. *69
 Jancsó G. 70
 Jánossy M. 36, 37
 Jéki L. 12
 Jovicz D.* 54
 Kádár G. 50, 51, 52, 56
 Kertész I. 38
 Keszthelyi L. 16, 17, 18, 19, 21, 23, 31, 44, 45
 Khalkin V. A.* 71
 Kisdiné Koszó É. 48
 Kiss A. 12
 Kiss I. 70
 Kluge Gy. 27
 Komor M. 20
 Kövesy Zs. 10, 12, 24
 Kozmann G. 86
 Krasznovszky S. 1
 Krén E. 49, 50, 51, 52, 56
 Krjukov P. G. 40
 Kroó N. 42, 47, 53, 54, 55, 57
 Kulgawczuk D.* 16, 19, 44
 Kuprisov V. F. 40
 Lajtai A. 27
 Láng I. 95
 Lebegyev N. A.* 72

* nem tagjai az Intézetnek.

- Lévai F.* 43, 76, 77
 Lévai L. 86
 Lovas I. 13, 28, 29
 Makra Zs. 80, 81
 Marx Gy.* 7
 Masson A. J.* 69
 Matus L. 69
 Menyhárd N. 46
 Molnár B. 21, 31, 45
 Molnár F. 71, 72
 Muzsnay L. 83
 Nabil E.* 19
 Nagy Á. Z.* 94
 Nagy D. L. 21, 45
 Nagy E. 1, 2, 3, 4, 49
 Nagy L. 30, 49
 Nagy T. 30
 Náray Zs. 37, 38
 Németh A. 83
 Opauszky I. 69
 Orbán G. 47
 Pál L. 47, 48, 49, 50, 53, 54, 56, 57
 Palla G. 12
 Pallagi D. 78
 Pellionisz P. 43, 47, 57, 76, 82, 86
 Perjés Z. 5
 Pikalev E. M.* 58
 Pócs L. 31
 Révai J. 29
 Salamon T. 36, 37
 Schiller R. 73, 74
 Solyó J. 52, 58, 59, 60, 61, 62, 63, 64
 Somogyi A. 6
 Sterk E.* 16, 44
 Surányi P. 7, 8, 9, 10
 Szabó F. 43, 76, 83
 Szabó P. 49, 50, 51, 52, 56
 Szaklajda L. 75
 Szanyi L. 95
 Szatmáry Z. 83, 85
 Szavcsenko M. A.* 58
 Szenatszkij U. V.* 40
 Szép L. 83
 Szentpétery I. 23
 Szigeti B. 43, 76, 86
 Szigeti J. 35
 Szlávik F. 43, 47, 57, 76, 82, 83, 86
 Szőkefalvi-Nagy Z. 18, 23
 Szűcs J. 23
 Tarnóczy T. 50, 52, 56
 Tompa K. 41
 Tóth F. 41
 Tóth J. 65
 Tóth K. 11
 Tóth M. 81, 87
 Törő F. 95
 Turi L. 83, 85
 Turovcev V. V.* 15
 Válas Gy. 6
 Valkó J. 79, 83
 Vályi L. 32
 Varga A. 6
 Varga D.* 66
 Varga L. 17, 18, 23
 Varga P. 39, 40
 Várkonyi L. 75, 87
 Vasáros L. 68
 Vasvári B. 66
 Vértes A. 20
 Vértes P. 80, 83, 88, 89, 90, 94
 Vinnay, I. 30
 Vigassy J. 90
 Vidos G. 75
 Vizi I. 47, 48, 57
 Zámori Z. 18
 Zawadowski A. 61, 62, 63, 64, 67
 Zimányi J. 23, 33, 34
 Zobor E. 43, 76, 91, 92

SZERZŐ INDEX 1969

- Akhmadzhanov A. I.* 63, 64, 65
 András A. 100
 Androszenko H. D.* 14
 Anzon Z. V.* 1
 Aric M.* 56
 Balázs A. 21
 Bencze G. 15
 Berecz Gy. 16
 Betev B.* 2
 Biri J. 17, 29
 Bod L. 85
 Bogács J. 82
 Borob'eva V. G.* 18
 Bozók Gy. 3, 4
 Broda R.* 63, 64, 65
 Cameron J. A.* 19, 32
 Corradi G.* 51
 Czibók T. 20, 26
 Csajka M. 67
 Cser L. 53, 55, 61
 Csillag L. 41, 43
 Csőke A. 68
 Daneljan L. S.* 5, 28, 37
 Demeter I. 38, 39
 Dézsi I. 21
 D'jancsenko P. P. 18, 22
 Dudenkova A. V.* 42
 Ebert M.* 81
 Efimov B. V.* 5, 28
 Egri S. 23
 Elek A. 68
 Ermacsambetov Sz. B.* 14
 Fazekas P. 47, 62
 Fehér I. 160

- Fenyves E. 3
 Gardner P. R.* 19
 Gécs M. 83
 Gémesy T. 10, 11, 20
 Gombosi É. 3, 4
 Gorobchenko V. D.* 21
 Grasiuk A. Z.* 43
 Gróz P. 30, 71, 72
 Grüner Gy. 48, 49, 52, 58, 59
 Gyimesi Z. 86, 87
 Györgyi G. 24
 Hargitai Cs. 50, 51
 Hegyháti M. 69
 Hráskó P. 25
 Hrehuss Gy. 20, 26, 33
 Illy J.-né 70
 Jákly Gy. 70, 84
 Jánosy A. 52, 58
 Jánosy M. 41, 44
 Jáki L. 27
 Jovicz D.* 56
 Juhász J.* 45
 Kádár Gy. 54
 Kardon B. 5, 17, 23, 28, 29, 30, 37, 71
 Karika G.* 45
 Kecskeméti J. 31
 Kenyon D. B.* 32
 Kertész K. 68
 Keszthelyi L. 19, 32, 38, 39
 Keszthelyi-Lándori S.* 33
 Kiss D. 5, 28, 31
 Kiss G. M. 42
 Kiss I. 72
 Kluge Gy. 27, 34, 35
 Koch J. 6
 Koick S.* 40
 Konczos G. 53
 Kósa Somogyi I. 73
 Kosály Gy. 88
 Kostka P. 16
 Kovács I. 14, 20, 36
 Krén E. 54
 Krjukov P. G. 46
 Kroó N. 56
 Kuprisov V. F.* 46
 Kuz'minov B. D.* 22
 Lajtai A. 18, 22, 27, 35
 Láng I. 103
 Lavruhina A. K.* 67
 Lebedev N. A.* 74b, 75
 Lohonyai L. 37
 Lukashevich I. I.* 21
 Mester E.* 45
 Mogilner A. I.* 87
 Molnár B. 21
 Molnár F. 74a, 74b, 75
 Molnár J. 63, 64, 65
 Montvay I.* 7
 Mulikov V. F.* 43
 Nagy D. L. 53
 Nagy E. 1, 3, 60
 Nagy L. 20, 36
 Nagy T. 36
 Náray Zs. 44
 Nikitin V. V.* 42
 Novikov G. V.* 55
 Osztanévics Ju. M.* 53
 Pál L. 53, 56
 Perjés Z. 8
 Pócs L. 23, 38
 Pósch M. 4
 Prestwich M. V.* 19
 Quittner P. 76, 77, 78, 82
 Radak B.* 85
 Rausch H. 79
 Rehó J. 101
 Révész A. 72
 Rosta J. 102
 Salamon A. 79
 Schiller R. 80, 81
 Sebestyén Á. 9
 Seres Z. 5, 17, 23, 28, 29, 30, 37, 71
 Simonits A. 68, 82
 Sípó T. 72
 Sólyom J. 57
 Somlai L. 17, 29
 Somogyi A. 6
 Sotnikov S. K. 5, 28, 37
 Strugalski Z. S.* 10, 11
 Surányi Gy. 3
 Szabados L. 90, 91
 Szabó E. 67, 68, 82
 Szabó L. 28, 37
 Szabó Z. 5
 Szanyi L. 17
 Szatmáry Z. 87, 88, 92, 93
 Szegő K. 9
 Szemjonov A. Sz.* 42
 Szenatszkij Ju. V.* 46
 Szentpétery I. 15
 Szőkefalvi-Nagy Z. 38, 39
 Sztanev T.* 2
 Telbisz F. 3
 Tompa K. 49, 52, 58, 59, 60
 Tóth F. 49, 58, 59, 60
 Tóth K. 9, 12, 13
 Törő F. 103
 Turi L. 92, 94
 Vakatov P.* 103
 Válas Gy. 2, 6
 Valkó J. 89, 93
 Vancsek L.* 4
 Varga A. 6
 Varga L. 38, 39, 40
 Varga P. 45, 46
 Végh E. 104
 Vértes P. 95, 96

* jelöltek nem tagjai az Intézetnek.

Vesztergombi Gy. 3, 7
 Vincze I. 61
 Vinnay I. 20, 36
 Voszka R.* 83
 Wagner I. 6
 Wainerdi R. E.* 78
 Watterich A. *83

Williams M. M. R.* 94
 Zádor E. 66
 Zaharov J. P. 42
 Zahn J.* 84
 Zámori Z. 17, 23, 29, 30, 37, 39, 71
 Zawadowski A. 47, 57, 62
 Zobor E. 97, 98, 99

SZERZŐ INDEX 1970

Anzon Z. V. 1, 2
 Arszlonekov T. A. 25
 Artukh A. G. 14, 15, 16, 17
 Aszejkin V. Sz. 3
 Avdeichikov V. V. 14, 15, 16, 17
 Bakos J. 25, 26, 27, 28, 29, 30
 Bakos L. 59
 Bata L. 36
 Bánó I. 43
 Bányai É. 63
 Belevszkij V. N. 60
 Belevszkij V. N. 60
 Benkó Gy. 3, 4
 Békés E. 86
 Bíró J. 87, 88
 Bod L. 83
 Bogács J. 61
 Bogdanova N. 6
 Bollók L. 84
 Bozók Gy. 1, 2
 Brovman E. G. 52
 Bugajenko L. T. 60
 Cameron J. A. 18
 Csajka M. 62, 63
 Csath G. 75
 Csekalin Sz. V. 34
 Cser L. 37, 38, 70
 Csillag L. 31, 32
 Danilova T. V. 3
 Delona G. A. 30
 Delone N. B. 30
 Deme S. 45, 86, 90
 Deutsch B. I. 9
 Dézsi I. 37
 Döge H. G. 59
 Dubay M. 74
 Dyachenko P. P. 19, 22, 23
 Elek A. 61
 Erdey L. 62
 Erő J. 14, 15, 16, 17
 Farkas Gy. 32a, 33
 Farkas M. 65
 Fazekas P. 71
 Fehér I. 86, 87, 88, 89
 Fenyves E. 1, 2, 5
 Fodor I. 20
 Fodor M. 59
 Frenkel A. 5a
 Gémesy T. 5, 6, 7

Gibb A. W. 18
 Gimesi O. 62, 63
 Golubjev V. B. 60
 Gombosi É. 1, 2
 Goncharov G. N. 38
 Gridnev G. F. 14, 15, 16, 17
 Gróz P. 69a
 Gyarmati B. 58
 Hagemann K. A. 9
 Halkin V. A. 69a
 Hegyháti M. 64, 65
 Herskind B. 9
 Horváth I. 45
 Horváth Z. Gy. 33
 Illy H. 66
 Jancsó G. 68, 69, 77
 Janik J. 53
 Jákly Gy. 66
 Jánossy L. 95
 Jánossy M. 31, 32
 Jéki L. 21, 22
 Jovic D. 36
 Kabanova N. V. 3
 Kardon B. 8
 Kádár G. 42, 44
 Kántor J. 25, 26, 27, 28, 29, 30
 Kántor K. 32
 Kenyon D. B. 18
 Kertész J. 34
 Keszthelyi L. 18
 Király P. 96, 97
 Kiss Á. 25, 27, 28, 29, 50
 Kiss D. 8, 9
 Kiss I. 72
 Kluge Gy. 21, 22
 Koloszov N. P. 23
 Konamkov E. A. 34
 Konczos G. 50
 Kosály Gy. 53
 Kovács Gy. 43
 Krasznovszky S. 5, 6, 7
 Krén E. 42, 44
 Krjukov P. G. 34
 Kroó N. 45
 Kuzin V. J. 69a
 Kuzminov B. D. 19, 22, 23
 Lajtai A. 19, 21, 22, 23
 Major Á. 78
 Major Á. 78

- Makra Zs. 91, 92, 93, 94
Manakov N. L. 30
Marx Gy. 5a
Matus L. 70, 73
Menyhárd N. 46, 48
Mészáros I. 88
Mezei F. 47
Mikheev V. L. 14, 15, 16, 17
Miskovits G. 74
Molnár F. 72
Molnár J. 71,
Montvay I. 10
Muzsnay L. 84
Nagajeva M. 25
Nagy D. L. 37, 70
Nagy E. 1 2, 55
Nagy G. Á. 72
Nagy I. 49
Nefedov V. D. 69a
Nikolszkij Sz. I. 3
Norszejev J. V. 69a
Ogaza S. 9, 70
Opauszky I. 73
Orbadajev B. B. 4
Orbán É. 74
Ostanevich Ju. M. 39
Otnes K. 53
Ördögh M. 74, 75
Pál L. 39, 44, 49, 50
Pardari-Horváth M. 51
Perjés Z. 11
Perneczki G. 78
Pintér Gy. 5, 6, 7
Pokó Z. 59
Próbáld V. 84
Pupezin J. 68, 69, 76
Quittner P. 78
Rapaport L. P. 30
Rózsa K. 32, 35
Ruvalds J. 56, 57, 58
Salamon A. 79, 82
Salamon T. 31, 32, 34
Schiller R. 80, 81
Seres Z. 8
Simó W. 43
Solt G. 52, 53
Sólyom J. 47, 54
Strugalski Z. S. 5, 7
Suha Z. 86
Szabadházy A. 63
Szabó E. 61, 62, 74, 75, 78, 82
Szabó Z. 85
Szegő K. 12
Szenatszkij Ju. V. 34
Szergacsov A. I. 23
Szmirenkina L. D. 23
Sztamenov J. N. 3, 4
Tarnóczy T. 50
Taylor J. W. 77
Tomilov S. B. 38
Tompá K. 55
Toropova M. A. 69a
Tóth F. 55
Tóth K. 12, 13
Tölgyessy Gy. 82
Van Hook A. 68, 69, 77
Vályi L. 23
Vertse T. 98
Vesztergombi Gy. 5a, 10
Vincze I. 79
Volkov V. V. 14, 15, 16, 17
Vonokurova L. 51
Vorobjova V. G. 23
Waddington J. C. 9
Wilczynski J. 15, 16, 17
Wolfendale A. W. 96, 97
Zádor E. 60
Zawadowski A. 41, 47, 48, 56, 57, 58
Zimányi J. 98
Zimányi M. 98
Zobor E. 84
Zon B. A. 30
Zsigmond G. 45

KÖNYVISMERTETÉS

Leon Lederman and Joseph Weneser, Co-ordinators. Nuclear and Particle Physics Annual. Volume 1. 1967. Gordon and Breach, Science Publishers, New York, London, Paris.

„A fizikai kutatás terebélyesedésével és fokozott specializálódásával egyidejűleg ennek megfelelően növekedett a kibocsátott preprintek és folyóiratcikkek mennyisége is. Olyannyira, hogy a fizikus úgy érzi: egyre reménytelenebb, hogy megkíséreljen egymaga lépést tartani az új fejleményekkel a fizika egész területén; ez különösképpen a saját szakterületétől távolos területekre áll. Annál inkább fájdalmas ez, mivel a fizikát a legtöbben a tárgy egésze iránt érzett érdeklődésből választottuk, nem pedig azért, hogy pusztán egy szűk szakterület munkásai legyünk; amellet kézenfekvő a gyanú, hogy az irodalom hatalmas mennyisége egyre inkább elrejtí előlünk az igazán érdekes irányzatokat és fejleményeket.”

A fent megnevezett kötet „koordinátorainak” előszavából vett ezen idézet kétségkívül visszhangot kelt a fizika minden művelőjében, kiknek az itt vázolt probléma nagyon is elevenükbe vág. Az orvoslást célzó kezdeményezést csak üdvözölhetjük. A kötet „kolumnistái” kiemelkedő részecskefizikusok és magfizikusok; kéthavonta kibocsátott kommentárjaikban a folyó irodalomban megjelent, számukra legfontosabbnak látszó munkákról mondják el véleményüket. A szerkesztők szándéka szerint ezek a cikkek azzal kívánnak segíteni, hogy megmutatják a fejlődés irányát. A cikkek rövidke (a leghosszabbnak a terjedelme sem haladja meg a hét oldalt) és bevezető jellegűek; a specialistákon kívül a fizika más területein dolgozókhoz és az oktatással foglalkozókhoz is szólnak.

A kezdeményezés valóban új. Teljesen igazságtalan volna a tréfa, hogy a kötetben egybegyűjtött összefoglaló cikkek csak még növelik az irodalom amúgy is megemészthetetlen halmazát. Ellenkezőleg: a kitűnő tollú szerzők világosan és egyszerű útbaigazításukkal segítenek megtalálni, ami az irodalomban lényeges. A remény, hogy ez a kezdeményezés elősegíti majd, hogy a fizika hagyományos egysége bizonyos mértékig helyreálljon, mindenképpen jogosnak látszik.

F. E. Low a tér, a töltés és az idő tükrözési szimmetriáiról s azok sérüléseiről ír; felidéri a $\tau - \theta$ paradoxont, Lee és Yang feltevését és javaslatát, Wu kísérletét, végül a $K_2 \rightarrow \pi^+ + \pi^-$ bomlási mód (CP sértés) kimutatását Christenson és társai által. V. L. Fitch egyik írásában az $\eta \rightarrow \pi^+ + \pi^- + \pi^0$ bomlás töltésszimmetriájára kapott ellentmondó eredményeket ismerteti, másik cikke a K_2^0 és K_1^0 mezonok $\pi^+ \pi^-$, ill. $\pi^0 \pi^0$ bomlási amplitúdóinak viszonyára vonatkozó mérésekről számol be, melyek a szupergyenge CP sértő kölcsönhatás feltevésének tarthatatlanságát mutatják. Leír továbbá Fitch néhány kísérletet, melyek a korábbinál nagyobb pontossággal mutatják az időtükrözési invariancia teljesülését a béta-bomlásban, a semleges kaon $\pi \mu \nu$ bomlásában és a $\Lambda^0 \rightarrow \pi^- + p$ bomlásban. Foglalkozik Fitch a neutron elektromos dipólmomentumának két új mérésével ($\neq 0$ momentum annak jele, hogy mind a tér-, mind az időtükrözési invariancia sérül). Ramsay és társainak $(-2 \pm 3) 10^{-22} e$ cm-es, valamint Shull és Nathans $(+2,4 \pm 3,9) 10^{-22} e$ cm-es eredménye a neutron elektromos dipólmomentumára új korlátot ad, és valószínűsíti, hogy a $K_2 \rightarrow \pi^+ + \pi^-$ bomlási mód sem maximális elmg. CP sértés, sem pedig egy saját elektromos dipólmomentummal rendelkező W részecske feltételezésével nem magyarázható. S. Treiman ugyancsak a CP sértés helyzetéről ad áttekintést. L. B. Okun a paritás-sértő magerőkre vonatkozóan elvégzett és javasolt kísérleteket tárgyalja.

Több cikk csoportosul a részecskék elemi vagy összetett voltának kérdése köré. L. Van Hove azokat a bomlási valószínűségekre ($\omega^0 \rightarrow \pi^0 + \gamma$) és hatáskeresztmetszetekre ($pp, \pi p, Kp, Kn$ stb.) vonatkozó eredményeket foglalja össze, amelyek a kvarkoknak mint a hadronok elemi építőköveinek feltételezése alapján az additív közelítésben következnek; ott, ahol adatok állnak rendelkezésre, a kvark-modell következményei jól egyeznek a tényekkel. „Kvark-vadászat” című cikkében L. Lederman a Föld kérgét alkotó anyagok fiziko-kémiai analizisének, gyorsítós (CERN és Brookhaven), valamint kozmikus sugárzási méréseknek — mindeddig negatív — eredményeit ismerteti. F. E. Low „Elementaritás” c. cikke közül az elsőben arról ír, miként lehet különbséget tenni elemi és összetett részecskék között Regge szerint. A másodikban a Chew-Frautschi bootstrap (= csizma-húzó) feltevés megfogalmazását tárgyalja a Regge-trajektóriák elmélete keretében és a feltevés verifikálását

célzó munkákról ír; a kvarkok és a bootstrap hipotézis viszonyát, valamint a lokális áramok, ill. terménnyiségek létezésének lehetőségét taglalja. A Gell-Mann átal — a kvark-modell sugalmazását követve — feltételezett áram-kommutátorok és a PCAC (= részlegesen megmaradó axiáláram) hipotézis következményeit (Adler, Weisberger és Weinberg munkáit) *S. Treiman* cikke tekinti át.

A Regge-pólusok kérdésköréből *G. F. Chew* a különböző tömegű részecskék reakcióit ragadja ki és ismerteti Mandelstam feltevését a „leány”-trajektóriák végtelen sorozatának létezéséről; beszámol *Freedman* és *Wong* vizsgálatairól, melyek szerint a Bethe—Salpeter-egyenlet *Domokos* és *Surányi*, valamint *Toller* által felismert speciális szimmetriája éppen a *Mandelstam*tól feltételezett mechanizmushoz vezet. *Chew* egy másik cikkének tárgya a Regge-képlet zérushelyei. Cikkét szentel ezen kívül a Pomerancuk-trajektóriával összefüggő problémáknak. Végül tárgyalja a pion helyzetét a hadron-hierarchiában. *M. Goldberger* a Regge-elmélet egyes érdekes vonatkozásairól ír, melyek a spinnel rendelkező részecskék tárgyalásával kapcsolatban merülnek fel. *S. D. Drell* a Regge-pólusok hipotézisének a fontos folyamatokra való alkalmazásával s a szuperkonvergenciának az elektromágneses tömegkülönbségek kiszámításában játszott szerepével foglalkozik. A szuperkonvergencia fogalmát *F. E. Low* tekinti át, egy másik cikkében az erős kölcsönhatások szimmetriáinak és a gyenge áramoknak a kapcsolatát tárgyalja.

R. Wilson kommentárjainak sorában a nukleon alakfaktoráról és a ρ -mezon dominanciáról, a proton gerjesztett állapotairól, a nagyenergiájú nukleonszórásról, valamint az elektron-pozitron tárológyűrűkkel végzett kísérletekről olvashatunk. *L. Van Hove* a pion-nukleon töltéskicsérelő szórás differenciális hatáskeresztmetszetét és dinamikáját tekinti át.

A kvantumelektrodinamika kísérleti igazolásának helyzetével foglalkozva *R. Wilson* ismerteti a Lamb-eltolódás kísérleti és elméleti értékei között talált diszkrepanciát, s a hidrogén hiperfinom-szerkezetére és az elektron-pozitron-párok fotokeltésére vonatkozó, kielégítőnek látszó eredményeket. *S. D. Drell* taglalja a kvantumelektrodinamika érvényességének elméleti távlatait is.

A röntgenszállagászati megfigyelések eredményeit *E. E. Salpeter* tekinti át. Egy másik cikkében a Nap lapultságát tárgyalja, ismertetve *Dicke* és *Goldenberg* $(r_{\text{egyenlítő}} - r)/r_{\text{pólus}} = (5 \pm 0,7) 10^{-5}$ eredményét; rámutat a lapultság befolyására az általános relativitásból következő s a mért perihélium-elfordulás összehasonlításával kapcsolatban.

*D. H. Wilkinson*nak a K -mezonatomok röntgensugárzásáról és a nagyenergiájú magszerkezet-kísérletekről, valamint *H. Feshbach*nak és a *A. K. Kermann*nak a nagyenergiájú protonok magon való szóródásáról írott cikkei elvezetnek bennünket az atommag problematikájához. A magfelületnek *Wilkinson* két cikket szentel. Ezek egyikében a magfelületen fellépő korrelációkra (nukleon-csoportosulásokra) utaló adatokat analizálja, a másik cikkében pedig a K -mezon emulzióban fellépő abszorpciójának mérését ismerteti, mely arra utal, hogy a magfelület neutronokban gazdag. Ezen kívül foglalkozik *Wilkinson* az effektív töltés kérdésével a könnyű magokban. *D. A. Bromley* és *J. Weneser* beszámolóinak tárgya: a mag kiterjedése és alakja, s a vibrációs spektrummal rendelkező magok. *D. M. Brink* és *R. E. Peierls* kommentárjaik sorában a magszerkezet és a realiztikus magerők kapcsolatáról, a reakciómátrix elemeinek számításáról, a közvetlenül a kétnukleon-fáziseltolódásokon alapuló magszerkezet-számításról és a fenomenologikus magerőkkel végzett számításokról szólnak. *H. Feshbach* a magreakciók közbelső struktúráját tárgyalja. *A. K. Kermann*al közösen írott két kommentárjának az izobár analóg állapotok, valamint a magerők képezik tárgyát.

Ehhez hasonló kötettel, melyből ennyi új, izgalmas fizikát lehet tanulni, kétségkívül ritkán találkozhatunk. (Gy. G.)

MAGYAR
AKADÉMIAI
KÖNYVTÁRA

Technikai szerkesztő: Turchányi György
A kiadásért felel az Akadémiai Kiadó igazgatója — Műszaki szerkesztő: Helle Mária
A kézirat beérkezett: 1972. I. 24. — Terjedelem: 8,2 (A/5) ív

72-332 — Szegedi Nyomda

A MAGYAR
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
MATEMATIKAI ÉS FIZIKAI TUDOMÁNYOK
OSZTÁLYÁNAK
KÖZLEMÉNYEI

Matematikai, fizikai, csillagászati dolgozatokat, referátumokat, könyvismertetéseket, a Tudományos Minősítő Bizottságnak a III. Osztályra vonatkozó híreit s a III. Osztály híreit közli. Évenként egy kötet (kb. 40 ív) jelenik meg (négy szám alkot egy kötetet).

A Közlemények előfizetési ára kötetenként, azaz évenként 60 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, Budapest V., Alkotmány u. 21. Pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11488, külföldi megrendelések a „Kultúra”

Könyv- és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat,

Budapest I., Fő utca 32.

(Pénzforgalmi jelzőszám: 218-10 990 útján eszközölhetők.)

TARTALOMJEGYZÉK

	oldal
<i>Tarnóczy Tamás: A beszéd átlagos energiaszínképe hat nyelv alapján</i>	201
<i>Jiři Komrská, Dalibor Peňáz: A kémiai elemek egy paraméterrel jellemezhető egykristályainak elektrondiffrakciós vizsgálata</i>	227

KÜLFÖLDI PUBLIKÁCIÓK

MTA Központi Fizikai Kutató Intézet, Budapest	269
---	-----

KÖNYVISMERTETÉS

Leon Lederman and Joseph Weneser, Co-ordinators. Nuclear and Particle Physics Annual. Volume 1. 1967. Gordon and Breach, Science Publishers, New York, London, Paris. (Gy. G.)	295
--	-----

0
MAGYAR
FIZIKAI FOLYÓIRAT

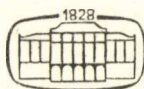
**A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI**

**KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR,
PÁL LÉNÁRD ÉS SZALAY SÁNDOR
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL**

**SZERKESZTI
JÁNOSSY LAJOS**

XX. KÖTET

4. FÜZET



**AKADÉMIAI KIADÓ
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
BUDAPEST 1972**

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA III. OSZTÁLYÁNAK

FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: BUDAPEST V., ALKOTMÁNY UTCA 21. SZ.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A klaszszikus irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikkeket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10–10 dolgozat megjelenése után a folyóiratfüzetekről leválasztva, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóirattól évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 ív terjedelemben.

A kéziratok a következő címre küldendők:

Jánossy Lajos akadémikus
Budapest, XII., Konkoly Thege út
Központi Fizikai Kutató Intézet

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként 48 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó. Budapest, V., Alkotmány utca 21. pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11 248. külföldi megrendelések a „Kultúra” Könyv- és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat, Budapest, I., Fő utca 32. (Pénzforgalmi jelzőszám: 218-10 990) útján eszközölhetők.

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmi ismertetőt írjanak.
2. A levezetéseknek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közöljék. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázó szöveget írjanak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.

MAGYAR
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
KÖNYVTÁRA

CHANNELING*

MEZEY GÁBOR

MTA Központi Fizikai Kutató Intézet, Budapest

TARTALOM

1. Bevezetés	297
2. Elmélet	299
2.1 Az ion és a kristályatomok kölcsönhatása	299
2.2 A kritikus szög	300
2.3 Dechanneling	303
2.4 A klasszikus leírás határai	303
2.5 Fékező képesség és channeling	304
3. Channeling effektus kísérleti vizsgálata	308
3.1 Orientálás	308
3.2 Hatótávolság	309
3.3 Transzmissziós kísérletek	310
3.4 Visszaszórás	313
3.5 Channeling vizsgálatok magreakciók segítségével	314
4. Kristályhibák és szennyezések vizsgálata channelinggel	315
4.1 Kristályhibák	315
4.2 Idegen atomok lokalizálása	318
4.3 Felületi szennyezések és amorf rétegek	319

1. Bevezetés

1963-ban *Robinson* és *Owen* számológéppel modellezték töltött részecskék áthatolását egykristályon. Nevezetesen azt vizsgálták, milyen az 1—10 keV-es nehéz ionok fékeződése a beesési irány függvényében, és azt tapasztalták, hogyha az ion kezdősebesség iránya egybeesik valamely kis Miller indexű iránnyal, a kristály anomálisan átlátszónak bizonyul.

Kísérletileg először ezt az effektust *Piercy* et. al [2], valamint *Lutz* és *Sizman* [3] vizsgálták. Hatótávolságot mértek, amelynek eredményéül az adódott, hogy kis indexű irányokban az ionok jelentős hányada rendellenesen nagy behatolóképes-séggel rendelkezik.

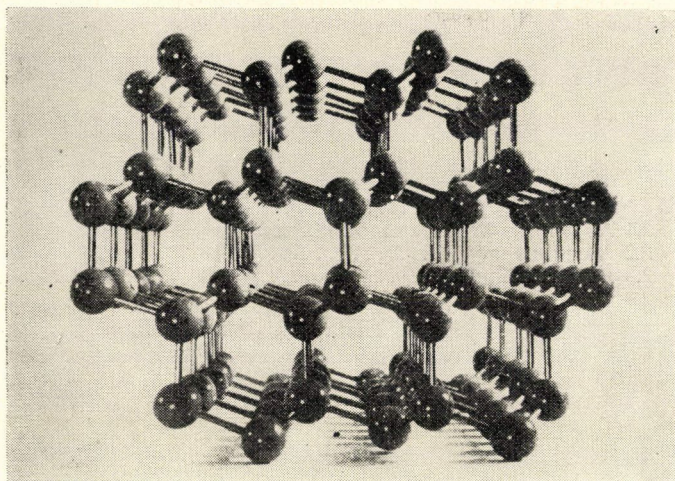
Ezzel egyidőben *Nelson* és *Thompson* anomálisan nagy transzmissziót figyeltek meg 50—75 keV-es protonokkal és hélium ionokkal vékony arany egykristályon [13]. E jelenség könnyen szemléltethető. Az 1. ábrán a gyémántrács az $\langle 110 \rangle$ irányból szemlélve üresnek tűnik, viszont ha gondolatban elforgatjuk a kristályt, ez az átlát-szóság megszűnik.

Ha töltött részecskét lövünk a rácsba, amely megfelelően kis szöget zár be vala-mely kis indexű rácssíkkal, vagy rácsiránnyal, kisebbet mint egy ψ_0 kritikus szög,

* Érkezett 1971. júl. 15.

befogódik és a továbbiakban az atomsor vagy atomsík mintegy csatornafal korlátozza a mozgását egymásutáni, kis szögű, korrelált ütközésekkel. Pályája így szinusz görbe lesz, amelynek tengelye az adott kristálytani irány.

Ezt a jelenséget nevezik csatorna effektusnak, channelingnek.

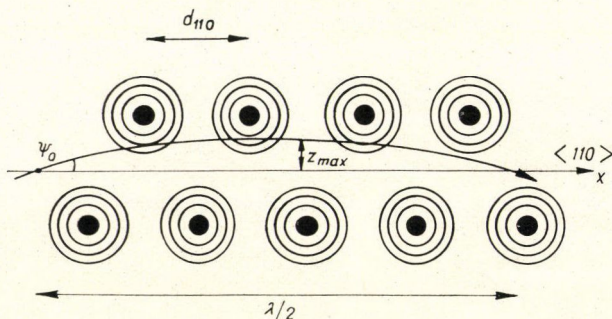


1. ábra

A 2. ábrán a fentiek sematikus vázlatát látjuk. Az arányok torzítottak. A legtöbb esetben az eltérítésben résztvevő atomok száma sokkal nagyobb az oszcilláció félhullámhossza alatt, rendszerint tíz, de néha százszorosa is.

A csatorna mentén mozgó töltött részek alkotják a rendezett, a tengelyhez orientált nyalábot. Amelyek $\psi > \psi_0$ szöggel jutnak a kristályba, többszörösen szóródnak, energiavesztésük rendszertelenné válik. Az ilyen részecskék alkotják a véletlen nyalábot. Ezért a kritikus szög a channelingnél döntő fontosságú.

A channeling komplemense a *blocking*, az az eset, amikor a kristályban a töltött részecske mozgása valamely irányban gátolt. Pozitív töltésű ionok számára channel-



2. ábra

ing irányok az atomsorok és az atomsíkok közötti tér, blocking irány maga az atomsor vagy sík. Elektronok számára a helyzet éppen fordított.

A részecske blocking számos esetben fellép, például ha emisszió történik rácshelyről.

2. Elmélet

2.1. Az ion és a kristályatomok kölcsönhatása.

Tekintsük át röviden valamely kristályos közegben mozgó ion és a rács atomjainak kölcsönhatását, illetve a kölcsönhatás szokásos közelítését. Egzakt, minden energián érvényes potenciált nem ismerünk.

Nagy energiákon ($E > 100$ MeV) elsősorban az árnyékolatlan atommagok közti kölcsönös tasztítás érvényesül a szórási folyamatban. Az energia csökkenésével azonban növekszik a kölcsönható objektumokat jellemző, ún. *legkisebb közeledési távolság*. Ez az ütközési folyamatban egyre jobb szeparálódást biztosít és ekkor már számottevővé válik az illető magokat körülvevő elektronburok árnyékoló hatása, erősen csökkentve a tasztítást.

Bohr [4] a fenti hatást exponenciálisan árnyékolt Coulomb potenciállal vette figyelembe

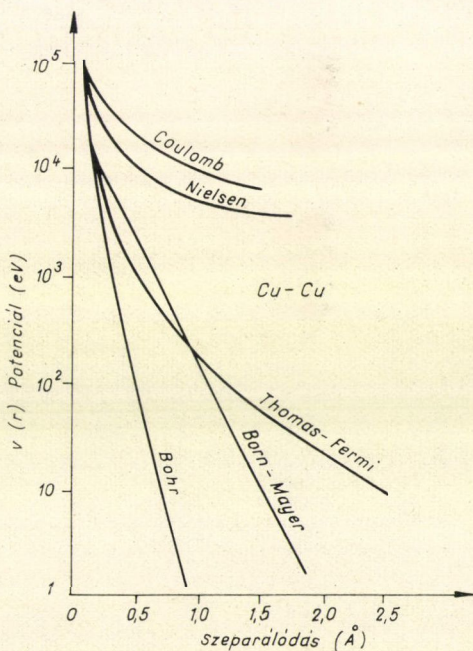
$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r^2} \exp\left(-\frac{r}{a_B}\right) \quad (1)$$

ahol r a két mag közötti távolság és a_B pedig a Bohr-féle árnyéksugár:

$$a_B = a_0 (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{1/2}$$

és $a_0 = \hbar^2 / m e^2$ a hidrogénatom Bohr sugara. Ez a potenciál $0,1$ – 1 Å határok között használható. A Bohr potenciáltól kevésbé különbözik a Born–Mayer-féle, amely azonos atomok $0,5$ – 2 Å közötti szeparálódásig érvényes:

$$V(r) = A \exp\left(-\frac{r}{a}\right) \quad (2)$$



3. ábra

Az „ A ” és az „ a ” értékeit minden fajta atomra tabellázták. A fentieken kívül még több egyszerű formula létezik, amelyek segítségével az ion-atom ütközés kielégítő módon tárgyalható analitikusan.

Néhányat feltüntettünk a 3. ábrán, ahol két rézatom közötti tasztítópotenciált láthatunk a távolság függvényében.

A valóságot a Thomas—Fermi statisztikus atommodellből levezetett potenciál közelíti meg legjobban:

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \Phi_0 \left(\frac{r}{a_{TF}} \right) \quad (3)$$

ahol

$$a_{TF} = 0,46 (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{-1/2} \quad (4)$$

és $\Phi_0 \left(\frac{r}{a_{TF}} \right)$ a Fermi-függvény [9].

2.2. A kritikus szög

A bevezetőben rámutattunk, hogy channeling csak a csatorna tengelyéhez képest kis szöggel mozgó ionok esetében lép fel. Említettük azt is, hogy a részecske kormányozásában sok atom vesz részt, így a channeling körülmények között mozgó részecske csak a $V(r)$ potenciál átlagát érzi. Bevezetjük az $U(r)$ függvényt, az atomsor hossztengetyére jutó átlagpotenciált a következő definícióval

$$U(r) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx}{d} V(\sqrt{x^2 + v^2}) \quad (5)$$

ahol d jelenti az atomok közötti távolságot a csatorna mentén.

Ha a Thomas—Fermi típusú potenciált használjuk az

$$U(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{d} \cdot \xi \left(\frac{r}{a_{TF}} \right) \quad (6)$$

alakban írható. Lindhard [8] a ξ függvényt

$$\xi \left(\frac{r}{a_{TF}} \right) \sim \ln \left[\left(\frac{C a_{TF}^2}{r} \right) + 1 \right] \quad (7)$$

formában közelítette, ahol $C = \sqrt{3}$ integrációs állandó. Ez az eljárás a csatorna úgynevezett kontinuum közelítése, mivel a határoló atomsort hosszúság egységként $U(r)$ potenciállal rendelkező, folytonos, töltött fonallal helyettesítjük.

A kontinuum közelítés kielégítőnek bizonyult és a belőle származtatható kifejezéseket széles energiatartományban igazolták kísérletileg 30 keV-től 80 MeV-ig, sokféle részecskével, protontól az I^{127} ionig.

Most vizsgáljuk meg $\psi \leq 1^\circ$ szöget bezáró töltött részecske eltérülését ilyen fonalon. Legyen a csatorna tengelye X, a taszító potenciál pedig Z irányú. Jelöljük az ütközés időtartamát Δt -vel. A sebesség csatorna menti komponense: $v \cos \psi \sim v$. E két mennyiség szorzata sokkal nagyobb, mint a rácsállandó, mivel az eltérítésben sok atom vesz részt. Legyen r_{\min} a legkisebb közeledés távolsága a fonalhoz. Ekkor az ütközési időtartam $\frac{r_{\min}}{v \cdot \sin \psi}$ nagyságrendű. Így

$$\Delta t \cdot v \cdot \cos \psi \cong \frac{r_{\min}(\psi)}{\psi} \cong d \quad (8)$$

Az r_{\min} abból a feltételből határozható meg, hogy a részecske mindaddig közeledik a fonalhoz, míg a potenciális energia egyenlővé nem válik a mozgási energia a fonalra merőleges irányú komponensével:

$$U(r_{\min}) = \frac{1}{2} M_1 v^2 \cdot \sin^2 \psi \quad (9)$$

ahol M_1 a lövedék ion tömege.

Az r_{\min} gyorsan csökken ψ növekedésével. A csökkenés nem tarthat minden határon túl, egy bizonyos r_{\min} alatt a részecske kiszökik a csatornából és a véletlen nyalábba kerül. A (7), (8) és (9) felhasználásával a channeling feltételül:

$$\frac{ca_{TF}}{\psi d} \cdot \exp \left\{ -\frac{\psi^2 d}{2b} \right\} > 1 \quad (10)$$

adódik, ahol $b = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{d}$ a Bohr-féle ütközési átmérő. A ψ növekedésével az egyenlőtlenség felborul, mivel az exponenciális tag sokkal gyorsabban csökken, mint a szorzó-faktora. Ezért a (10) csak akkor teljesül, ha

$$\psi < \psi_K = \sqrt{\frac{2b}{d}} = \sqrt{\frac{E_1}{E}} = \left(\frac{2Z_1 Z_2 e^2}{Ed} \right)^{1/2} \quad (11)$$

ahol $E_1 = \frac{2Z_1 Z_2 e^2}{d}$ és $\frac{ca_{TF}}{\psi d} > 1$. Az utóbbi egyenlőtlenségből következik, hogy az így nyert kritikus szög csak

$$\psi_1 \leq \frac{a_{TF}}{d} \quad \text{vagyis} \quad E > E' = 2Z_1 Z_2 e \frac{d}{a_{TF}^2} \quad (12)$$

esetben érvényes.

Mivel ψ energia függő és fordítva arányos annak négyzetgyökével, ezért az r_{\min} is hasonló függést mutat. Így a nagyobb energiájú töltött részecskék „lyukasabbnak” látják a kristályt. A r_{\min} alsó határa (8) és (12) segítségével

$$r_{\min}(\psi_K) = a_{TF} \quad (13)$$

A csatornára talált részecske tehát nem kerül közelebb a csatorna falát alkotó atomokhoz, mint a Thomas—Fermi-féle árnyékolási távolság. Ez a legtöbb anyagra 0,1—0,2 Å. Ezt azért fontos kiemelni, mert az ilyen ionok számára minden olyan kölcsönhatás tiltott, amely a_{TF} -nél kisebb impakt paramétert kívánna. Ilyenek a magreakciók, Coulomb gerjesztés, Rutherford szórás és a lezárt elektronhéjak gerjesztése.

Alacsonyabb energiákon, ha $E < E'$, vagyis ha $\psi_K > \frac{a}{d}$, az előzőhöz hasonló úton a kritikus szög

$$\psi < \psi'_K = \left(\frac{ca_{TF}}{d \cdot \sqrt{2}} \cdot \psi_K \right)^{1/2} \quad (14)$$

nagyságúnak adódik.

A fentiek arra az esetre vonatkoznak, amikor a részecske kis Miller indexű kristálytengelyek mentén halad. Channeling fellép akkor is, ha a részecske kis indexű

síkok mentén mozog. A fizikai kép változatlan, csak a végeredmény módosul némileg. Az átlagpotenciál a siktól Z távolságban

$$U_S = 2\pi N_S \int_{-\infty}^{+\infty} rV(\sqrt{Z^2 + r^2}) dr \quad (15)$$

ahol N_S a síkbeli atomsűrűség és $r^2 = x^2 + y^2$ a síkkal párhuzamos koordináta. Lindhard-féle közelítésben:

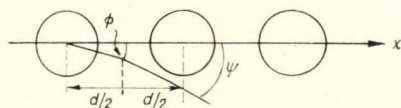
$$U_S(Z) = 2\pi Z_1 Z_2 e^2 N_p \{(Z^2 + c^2 a_{TF}^2)^{1/2} - Z\} \quad (16)$$

A kritikus szög ebben az esetben:

$$\psi_S = \left(\frac{2\pi N_S Z_1 Z_2 e^2 a_{TF}}{E} \right)^{1/2} \quad (17)$$

Ha a részecske rácshelyről emittálódik, blockingról beszélünk. Lindhard levezette a kritikus szöget erre az esetre is.

Tegyük fel, hogy az iont olyan atomsor tagja bocsátja ki Φ szög alatt, amely termikus mozgást nem végez (4. ábra).



4. ábra

Tegyük fel továbbá, hogy az első eltérülést $X = \frac{d}{2}$ távolság megtétele után szenved el. Ekkor az atomsortól $Z = \frac{1}{2} \Phi \cdot d$ távolságban tartózkodik. Az energia megmaradás törvényéből:

$$E\psi^2 = E\Phi^2 + U(\frac{1}{2} \Phi d)$$

Az U helyébe (6) és (7) helyettesítésével és E -vel, osztva

$$\psi^2 = \Phi^2 + \frac{\psi_K^2}{2} \cdot \log \left(\frac{4c^2 a_{TF}^2}{d^2 \Phi^2} + 1 \right) \quad (18)$$

A (18) minimuma a

$$\Phi^2 = -\frac{2c^2 a_{TF}^2}{d^2} + \left[\left(\frac{2c^2 a_{TF}^2}{d^2} \right)^2 + \psi_K^2 \frac{2c^2 a_{TF}^2}{d^2} \right]^{1/2} \quad (19)$$

Megint két határesetben vizsgáljuk a kritikus szöget. Ha feltesszük, hogy ψ_K kicsi $\frac{a}{d}$ -hez képest, akkor

$$\psi_{\min} = \psi_K \cdot \left[\log \frac{\alpha \cdot c a_{TF}}{\psi_K d} \right] \quad \text{ha} \quad \psi_K < \frac{a}{d} \quad (20)$$

itt $\alpha = 2^{3/2} \exp(\frac{1}{2}) \cdot A \psi_K$ együtthatója 1,5–2 nagyságrendű. Kisebb energiákon, ahol $\psi_K > \frac{a}{d}$ blocking kritikus szöge:

$$\psi_{\min} = 2 \left(\frac{\psi_K \cdot c a_{TF}}{\sqrt{2} d} \right)^{1/2} = 2 \cdot \psi'_K \quad (21)$$

2.3. Dechanneling

A channeling előbbi feltételei még nem teljesek. Tekintsük azt az esetet, amikor töltött részek párhuzamos nyalábjá éppen eléri valamely hibamentes merev kristály felszínét csatorna irányba. Az ionok nagy része a csatorna mentén csapdába kerül a $\psi < \psi_c$ feltételnek megfelelően. Kisebb részük, amely ugyan a tengelyhez képest a kritikusnál kisebb szög alatt mozog, de a csatornafalat a_{TF} -nél kisebb távolságban éri el, az atommagok Coulomb-terében nagyszögű Rutherford-szórást szenvednek. Ezek az ionok áthatolnak a csatornafalon, a véletlen nyalábba kerülnek és nagy részük visszaszóródik.

A beeső nyalábnak ez a hányada

$$\chi = \pi a_{TF}^2 Nd \quad \psi = 0 \quad (22)$$

esetén a kristály felszínén. Tipikus érték ha $\psi_K \sim 1^\circ$ és $a_{TF} = 0,1-0,2 \text{ \AA}$, akkor $\chi \sim 1-10\%$.

Tehát ideális (hibamentes) rács esetében a részecskék 90% csatornára talál. Ha a rács hőmozgását is figyelembe vesszük a

$$x(\psi = 0) = \pi(a_{TF}^2 + \varrho^2) \cdot Nd \quad (23)$$

alakban írható, ahol ϱ^2 a rácsrezgések csatornára merőleges komponensének középérték négyzete.

2.4. A klasszikus leírás határai

Az előbbieken a kristállyal kölcsönható iont és a rács atomjait hallgatólágoosan klasszikusnak tettük fel a következő okokból.

A részecske Broglie-féle hullámhossza $\lambda q = \frac{\hbar}{Mv} = \frac{\hbar}{p} \sim 10^{-3} \text{ \AA}$, 1 keV-es protonokra kb. ezerszer kisebb, mint a normális rácsávolság. Ez egymagában még nem biztosítja a klasszikus elmélet használhatóságát. Az ion eltérülésének még egy kritériumot kell teljesíteni.

Tegyük fel, hogy a szórás szög kicsiny, amikor a részecske szóródik a csatorna falát alkotó egyik atomon. Vegyük fel ismét a csatorna tengelyt x , a taszító potenciált pedig z irányba. A részecskét reprezentáló hullámcsomag z irányú elmosódottsága $\delta z = \hbar / \delta p_z$, szögmérséklése δ , $\theta = \delta p_z / p = \lambda q / \delta z$. Az utóbbi sokkal kisebb kell legyen, mint a θ szögmérséklés. Vagy ami ugyanazt jelenti a z irányú elmosódottság sokkal kisebb, mint az ütközés impakt paramétere. Bohr nyomán [4] bevezethetünk még egy járulékos szögmérséklést, amely a szóródási szögnek az impakt paramétertől való függéséből ered.

Legyen ez $\delta_2 \theta = \delta_z \cdot \theta'(b)$. A teljes szögfluktuáció négyzete $\delta^2 \theta = \frac{\lambda_q^2}{\delta_z^2} + \delta_z^2 \theta'^2$.

E kifejezés szélsőértéke a $\delta_z^2 = \frac{\lambda_q^2}{\theta}$ helyen lesz és itt $\delta \theta^2 = 2 \lambda q \theta' \ll \theta^2$, ami azt jelenti, hogy a hullámcsomag jól, lokalizáltan szóródik. Lindhard [8] kimutatta, hogy a klasszikus elmélet akkor is használható ilyen típusú ütközések sorozatára, ha az ütközések egyenként nem tárgyalhatók klasszikusan.

Minket csak a „hullámhossz” érdekel, amely mint láttuk, sokkal nagyobb, mint a rácsávolság. $\lambda \gg d$ esetében a részecske csak a potenciál átlagértékét érzi. A potenciál minimuma a csatornatengely mentén van, $Z=0$ -nál.

A klasszikus elmélet használatához elegendő megmutatni, hogy a hullámcsomag x irányú kiterjedése, amelyet jelöljünk Δx -szel, elegendően kicsiny λ -hoz képest. (A Z irányú kiterjedés gyakorlatilag konstans.)

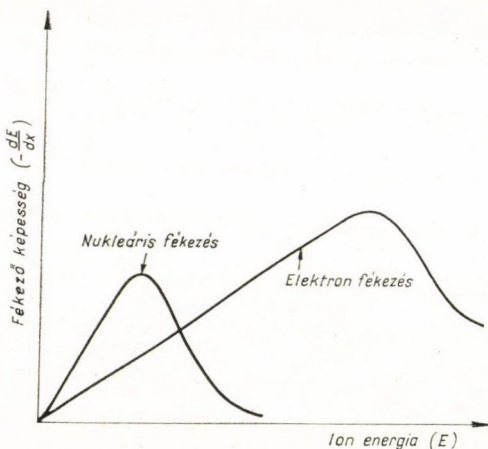
Induljon a hullámcsomag $t=0$ -ban $\delta x^2 \ll \lambda^2$ szélességgel, t idő múlva a $\Delta x^2 = \delta x^2 + \left(\frac{\hbar t}{M\delta x}\right)^2$ lesz. Vagy $vt=\lambda$ helyettesítéssel: $\Delta x^2 = \delta x^2 + \lambda_q^2 \cdot \lambda^2/\delta x^2$. Az x^2 maximuma az $x^2=q$ helyen lesz és itt a $\Delta x^2 = 2\lambda q\lambda$, amely nyilván kisebb, mint λ . Ezért a klasszikus leírás használata jogos volt.

2.5. Fékező képesség és channeling

Nagyszámú elméleti és kísérleti munka foglalkozott ezidáig a töltött részecskék és kristályok kölcsönhatásával. Ezek közül igen sok tárgyalta az energia veszteség és a hatótáv problémáját, vagyis azt, hogy milyen fizikai folyamatok során veszíti el a beeső ion a mozgási energiáját és milyen vastagságú kristályrétegen kell keresztül hatolnia, hogy nyugalomba kerüljön. Ennek ellenére e kérdések még a mai napig sem tisztázódtak megnyugtató módon.

Az energiavesztés és a fékezőképesség vizsgálatánál szokásos két fő folyamatot megkülönböztetni. Az egyik az elektronburkaik által árnyékolt atommagok Coulomb-kölcsönhatása (nukleáris fékeződés), a másik pedig a mozgó ion és a szabad vagy kötött állapotú elektronok ütközése során bekövetkező energiavesztés (elektron fékeződés). A pontosabb számításokhoz még egy harmadik folyamatot is figyelembe kell venni: a töltéscserélődést az ion és a target atomok között. Ez utóbbi csak abban a tartományban számottevő, ahol az ion sebessége összemérhető a rácscsatornákban kötött elektronok Bohr-féle sebességével a $V_B = \frac{Z_2 e^2}{\hbar}$ -al. Itt Z_2 a rácscsatorna atom rendszáma. Ekkor az ion nagy valószínűséggel befog egyet a kristály elektronjai közül (cserélődési fékezés).

A teljes fékező képesség, vagyis a fajlagos energiavesztés e három komponens összege:



5. ábra

$$\left(-\frac{dE}{dx}\right) = \left(-\frac{dE}{dx}\right)_{\text{nucl}} + \left(-\frac{dE}{dx}\right)_e + \left(-\frac{dE}{dx}\right)_{\text{cs}} \quad (24)$$

Alacsony energiákon a nukleáris fékezés dominál, nagyenergiákon pedig már az elektron ütközés. A közbeeső tartományban a töltéscserélődési járuléka a számottevő, durván 10%-a a teljes fékezőképességnek.

Az 5. ábrán az előző két járulék vázlatos energia függését tüntettük fel. E karakterisztikus energiafüggés sugallja a fenti szétválasztást, az egyes folyamatok kissé erőszakoltan elkülönített tárgyalását.

2.5.1 Elektron fékeződés

Bohr [4], aki amorf és polikristályos közegben vizsgálta a fékezés problémáit, megmutatta, hogy ez két egyenértékű folyamatban történhet, úgymint „távoli rezonáns energia átadás” és a „közeli impakt típusú ütközés” révén.

Channeling esetén a távoli folyamatok ugyanolyan valószínűséggel rendelkeznek, mint polikristályban, de a közeli ütközések száma csökken, mert az elektronsűrűség a csatorna mentén kicsiny és az ion a magasabb sűrűségű rétegeket elkerüli. Így az energiavesztés nagymértékben csökken.

A $\left(-\frac{dE}{dx}\right)_e$ kiszámításához a kristály elektron állapotait a rácsatomok héjmodellje alapján lehet közelíteni. E közelítés lényege, hogy mindegyik rácsatomot egy pozitívan töltött törzs, (amely az atommagból és szilárdan kötött belső zárt elektronhéjakból áll) és egy negatív töltésű, lazán kötött külső elektronburok reprezentál. A különböző héjak és törzsek a rácsban függetlenül mozognak a köztük ható erők hatása alatt. (Hasonló modell használatos a hosszútávú erők figyelembevételére a fonon disperziós görbék számításánál.) E modell szerint pl. a germánium primitív cellája négy független tömegből áll, két törzsből és két héjból.

A szokásos fonon elmélet harmonikus közelítésben így négy sávot ad a fononszerű gerjesztésekre. Kettő ezek közül a normál akusztikus és optikai sáv, amely olyan módusokat tartalmaz, ahol az atomtörzsek és a hozzájuk kapcsolódó elektronhéjak fázisban mozognak. A fennmaradó két sáv olyan rezgéseknek felel meg, ahol a törzs és az elektronburok ellentétes fázisban mozog, és így az utóbbiak már a *kristály elektronjainak* tekinthetők. Ezek a módusok lokális, időfüggő polarizációt jelentenek és ezért polarizációs módusoknak nevezzük. E gerjesztési tartomány kis energiájú része a kristály *plazmon* gerjesztéseivel azonosíthatók.

Ezért a továbbiakban az elektron fékeződést mint egy elektrongázon áthaladó longitudinális zavart tárgyalhatjuk, ha bevezetjük az elektrongáz $\epsilon(\vec{k}, \omega)$ komplex dielektromos állandóját.

Ha a részecske visszalökődésétől eltekintünk, az energia és az impulzusmegmaradásából kapható

$$\hbar\omega = \vec{v} \cdot (\hbar\vec{k}) \quad (25)$$

ahol \vec{v} a részecske sebessége, $\hbar\omega$ az energia és $\hbar\vec{k}$ az impulzus átadás az elektrongáznak.

A fékezőképesség általános formája Lindhard nyomán [47]

$$-\frac{dE}{dx} = \left(\frac{2Z_1 e^2}{\pi v^2}\right) \cdot \int \frac{dk}{k} \int d\omega \cdot \omega Jm \left[\frac{1}{\epsilon(k, \omega)} \right] \delta(\omega - vk\xi) \quad (26)$$

ahol ξ a \vec{v} és \vec{k} vektorok közötti koszinusz. Bethe összecsabállya szerint

$$\int_0^\omega d\omega \cdot \omega Jm \left[\frac{1}{\epsilon(k, \omega)} \right] = \frac{\pi}{2} \cdot \omega_p^2 \quad (27)$$

ahol $\omega_p = \left(\frac{4\pi n e^2}{m}\right)$ a plazmafrekvencia és n az elektronsűrűség.

Innen adódik:

$$\left(-\frac{dE}{dx}\right)_e = \frac{4\pi Z^2 ne^4}{mv^2} \ln \left(\frac{2mv^2}{\hbar\omega_p}\right) \quad (28)$$

A k szerinti integrálást az impulzusátadás alsó és felső korlátja között végeztük, amely $\hbar k_{\min} = \frac{\hbar\omega_p}{v}$, illetve $\hbar k_{\max} = 2mv$.

Kis sebességekre, ahol $V \ll V_F$ (V_F a Fermi-féle sebesség az elektrongázban) a fékező erő problémája hasonló a híg ötvözetekben fellépő maradék ellenálláshoz, ahol az elektronok álló, töltött szennyezőkön szóródnak. Ezt a problémát Born-közelítésben szokásos tárgyalni, ezért a $\left(\frac{dE}{dx}\right)_e$ kiszámítása is ugyanazon perturbációs módszerrel történik, mivel itt is a relatív sebesség az alapvető. Kicsiny v -re egyszerűen v_F írható, mivel csak a legnagyobb energiájú elektronokon, a Fermi-felület közelében történhet szóródás.

A fékező képesség ezen az alapon:

$$\left(-\frac{dE}{dx}\right)_e = \frac{2Z_1^2 e^4 m^2 v}{3\pi\hbar^3} \ln \left(\frac{\hbar v_F}{e^2}\right) \quad (29)$$

amely egyenesen arányos a beeső részecske sebességével, vagyis az energia négyzetgyökével. Mivel a hatótávolság:

$$R(E) = \int_0^E \left(-\frac{dE}{dx}\right) \quad (30)$$

ezért az elektron fékező képesség tartományában az $R \sim E^{1/2}$.

2.5.2 Nukleáris fékeződés

Kicsiny energiákon ugrásszerűen megnő az atommagokon történő szóródás hatáskeresztmetszete. A csatorna mentén mozgó részecske útja legnagyobb részén csak az elektronokkal történő kölcsönhatás során adja le az energiáját, pályája végén viszont, amikor energiája már kicsiny, csaknem teljes egészében az atommagon történő pillanatnyi ütközésekkel veszíti el.

Brinkman [32] szerint:

$$P(b) = \left(\frac{2M_1}{E}\right)^{1/2} \int_0^\infty \frac{b \cdot dr}{(r^2 - b^2)^{1/2}} = \left(\frac{2M_1}{E}\right)^{1/2} K(b) \quad (31)$$

ahol b az ütközés impakt paramétere. Born—Mayer potenciált felvéve a $K(b) = \frac{A}{a} b K_0 \left(\frac{b}{a}\right)$ alakba írható, ahol K_0 a Hankel-függvény.

Az energia veszteség ilyen ütközések során egyszerűen:

$$\Delta E = \frac{P^2(b)}{2M_2} = \left(\frac{M_1}{M_2}\right) K^2(b) \quad (32)$$

A fékező képesség, ha az ion D távolságot tesz meg a csatorna mentén és közben N ütközést szenved:

$$\left(-\frac{dE}{dx}\right)_{\text{nucl}} = \frac{M_1}{M_2 ED} \cdot \sum_{i=1}^N K^2(b_n) \quad (33)$$

A maximális hatótávolság (30)-ból, E beesési energiával

$$R_{\text{max}}(E) = \frac{1}{2} D \frac{M_2}{M_1} \left(\sum_{i=1}^N K^2(bn) \right)^{-1} E^2 \quad (34)$$

nagyságúnak adódik.

2.5.3 Töltéscserélődés

Ez az effektus viszonylag szűk sebességtartományban számottevő és nem túlságosan pontos számításokban figyelmen kívül hagyható.

Ha Φ_Z -vel jelöljük annak a valószínűségét, hogy a Z töltésű ion befog egy elektront a környezetéből és $\sigma_{Z,Z-1}$ -gyel jelöljük e folyamat hatáskeresztmetszetét, a cserélődési fékeződés

$$\left(-\frac{dE}{dx}\right)_{\text{cs}} = N \cdot \sum_Z \Phi_Z \sigma_{Z,Z-1} (J + E_K) \quad (35)$$

Itt J az elektron átlagos kötési energiája az abszorbensben, $E_K = \frac{1}{2} mv^2$ és N a cm^3 -kénti atomszám.

A számításokat nagyban egyszerűsíti, ha bevezetjük a Z iontöltés helyett a $Z(v)$ sebességfüggő effektív töltést a következő definícióval:

$$(Z_1^*)^2 = \left(-\frac{dE}{dx}\right)_{Z_1} \left/ \left(-\frac{dE}{dx}\right)_{\text{proton}} \right.$$

vagyis az illető közegben a Z töltésű ionra, valamint a protonra mért fékező erők hányadosa.

Roll és Steiger kimutatta, hogy ez a kifejezés a következő egyszerű formulával közelíthető:

$$Z_1^* = Z_1 \left[1 - \exp\left(-\frac{v}{v_F}\right) \right] \quad (36)$$

ahol $v_F = C/137$.

A $\sigma_{Z,Z-1}$ a sebesség növekedésével erősen csökken. Ha a σ_I az egyéb energia-vesztés hatáskeresztmetszete, Bohr [4] kimutatta, hogy $\frac{\sigma_I}{\sigma_{Z,Z-1}} \sim Z_2^2 \cdot v^5$ pl. protonra rézben ($Z_2=65$).

$$\frac{\sigma_I}{\sigma_{Z,Z-1}}(50 \text{ keV}) = 10 \quad \text{és} \quad \frac{\sigma_I}{\sigma_{Z,Z-1}}(100 \text{ keV}) = 100$$

3. Channeling effektus kísérleti vizsgálata

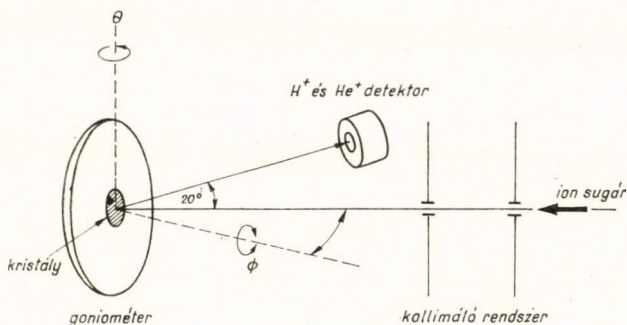
Attól függően, hogy milyen információra vagyunk kíváncsiak a vizsgált kristályról, a következő mérőmódszerek használatosak:

1. Hatótávolság
2. Transzmisszió
3. Visszaszórás (back-scattering)
4. Blocking

5. Másodlagos, a channelinget kísérő jelenségek:
magreakciók $[(p, \alpha), (p, \gamma)]$, elektronburok gerjesztése (p, x) .

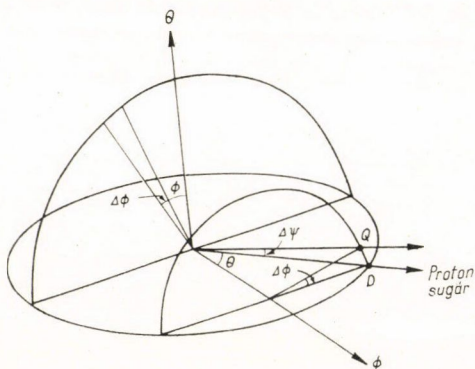
Az egyes konkrét berendezések a 2—4 technikán vagy kombinációkon alapulnak.

Channeling effektussal vizsgált anyagok száma igen nagy. A legtöbb mérés az egyszerű köbös rácsú f.c.c, b.c.c. és gyémánt rácsú félvezető egykristályokon történt (Ge, Si stb.), de vizsgálták a cinkblende típusokat is.



6/a ábra

A méréseket túlnyomórészt kisenergiájú (100 keV—30 MeV) gyorsítókön végezték. Elvi vázlata 6/a ábrán látható. Jól kollimált ($0,2^\circ$ — $0,03^\circ$) nyaláb goniométeren elhelyezett két vagy három tengely körül elforgatható egykristályra jut. A kristályon áteső vagy a visszaszóródott részecskéket félvezető detektor érzékeli.



6/b ábra

3.1. Az orientálás

Minden mérés a kristály orientálásával kezdődik. Ennek folyamán megkeressük a kívánt csatornát, vagyis olyan helyzetbe állítjuk a target anyagot, amelynél a gyorsító nyalábja párhuzamos valamely kis indexű (sík vagy tengely) iránnyal. Ezt az ábrán feltüntetett θ és ϕ körüli forgatással, valamint a dechanneling folytán visszaszóródott részecskék intenzitás mérésével

érhetjük el. A tökéletes orientáláshoz tartozó (θ, φ) értékpároknál minimumot kapunk a szóráshozamban.

A channeling szempontjából fontos az ún. *belső szög* a ψ , valamint a θ és φ szögek közötti összefüggés, a 6/b ábrán láthatók. Itt a megfelelő forgatásokat egységsugarú gömbön tanulmányozhatjuk. A $\varphi=0$ rögzített értéknél a θ szerinti forgatás az alapkörön, a $\theta=0$ esetében pedig a főkörön történik. A rajzból látszik, hogy

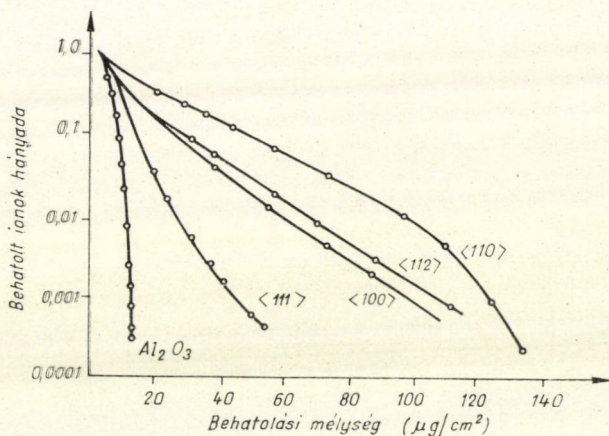
$$\Delta\psi = \Delta\varphi \cdot \sin \Theta \quad (37)$$

Ezért kicsiny θ szögnél a $\Delta\psi$ változása sokkal nagyobb, mint a $\Delta\varphi$ változás. Például ha $\theta=5^\circ$ és $\Delta\varphi=0,1^\circ$ a kristály orientációja a nyalábhoz képest $\Delta\psi=0,01^\circ$ változik.

3.2 Hatótávolság

Ebben a részben hatótávolságra vonatkozó méréseket vázoljuk és illusztráljuk néhány példával.

Alumínium egykristályt 40 keV K_r^{85} ionokkal bombázva a behatolási mélyre, a különböző axiális csatornák mentén, a 7. ábrán látható eredmény adódik. (Fel-tüntetve amorf Al_2O_3 -ban mért értékekkel). [2] A beeső ionok radioaktívak voltak.



7. ábra

Ha $W(x)$ a Kr ionok differenciális mélységeloszlását jelöli az integrális eloszlás $f(x) = \int_x^\infty W(x') dx'$. Az $f(x)$ -et mérték oly módon, hogy vékony rétegeket távolítottak el a felszínről maratással és a megmaradó aktivitás arányos volt az $f(x)$ -szel.

Mivel az alumínium f.c.c. rácsú, a legnyitottabb csatorna az $\langle 101 \rangle$ (itt a legkisebb az atomok közötti távolság). Az ábrából kitűnik, hogy ezt a kísérlet igazolta, az $\langle 101 \rangle$ mentén mérték a legnagyobb behatolást. Érdekességgént említjük, hogy az $\langle 100 \rangle$ és $\langle 211 \rangle$ felcserélődött. Az utóbbi mentén nagyobb volt a behatoló képesség, holott az $\langle 100 \rangle$ nyitottabb.

Ez a jelenség más esetben is fellépett, pl. b.c.c. rácsú 40 keV X_e ionokkal, ahol a legnyitottabb irányban, az $\langle 111 \rangle$ mentén kisebb volt az $f(x)$, mint az $\langle 100 \rangle$ -ban.

Kielégítő elméletet a fenti effektusokról még nem dolgoztak ki. Valószínűnek látszik, hogy az axiális csatornák nem teljesen meghatározottak a geometriai szimmetriák által, hanem anizotróp termikus fluktuációk is szerephez jutnak.

3.1.1 Energia függés

A 8. ábrán K_r^{85} maximális hatótávolságát látjuk alumínium $\langle 110 \rangle$ csatornája mentén az energia függvényében. Feltüntettük az elméleti görbéket is:

$$\left(-\frac{dE}{dx}\right)_{\text{nucl}} \sim E^2 \quad \text{és} \quad \left(-\frac{dE}{dx}\right)_e \sim E^{1/2}$$

40 keV fölött láthatóan az elektronfékeződés dominál és 20 keV alatt pedig a nukleáris fékeződéshez illeszkednek legjobban a kísérleti adatok.

A teljes fékezőképességet empirikusan a

$$\frac{dE}{dx} = \alpha E^{-1} + \beta E^{1/2} \quad (38)$$

alakban közelíthetjük az előbbieknél megfelelően.

Az 1. táblázatban feltüntettük az α és β értékét az X_e ionokra W-ban. Látszik, hogy a két csatorna között az elektronfékezőképesség

alig különbözik, míg a nukleáris energia veszteség drasztikusan változik. Ezért a csatornák között inkább a rugalmas potenciálkölsönhatásban van különbség.

A táblázatban $\bar{E} = \left(\frac{\alpha}{\beta}\right)^{2/3}$ -dal jelöltük azt az energiát, ahol a kétféle járulék egyenlővé válik.

I. TÁBLÁZAT

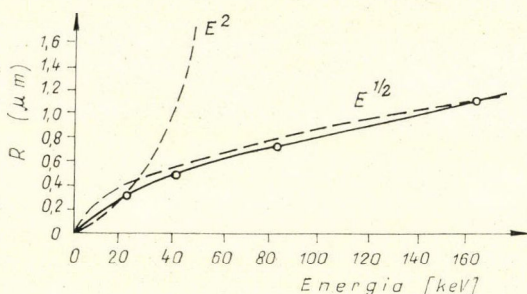
Csatorna	$\alpha [(\text{keV})^2 (\text{mg})^{-1} \text{cm}^2]$	$\beta [(\text{keV})^{1/2} (\text{mg})^{-1} \text{cm}^2]$	\bar{E}
100	40	12	2
110	250	16	6

3.3 Transzmissziós kísérletek

A bevezetőben említettük, hogy az első transzmissziós kísérletet Nelson és Thompson, hajtotta végre. 75 keV-es protonokkal és hélium ionokkal vékony 3000 Å vastagságú arany egykristály fóliát bombáztak [13].

Azt tapasztalták, hogy az áteső ionáram ugrásszerűen megnőtt, mikor a beeső sugár az $\langle 110 \rangle$ iránnyal volt párhuzamos.

Dearnaley [14] kiterjesztette a fenti mérést az átmenő ionok energia analízisével.



8. ábra

2 MeV-es protonokkal végzett kísérletek eredményét Si egykristályon a 9. ábrán láthatjuk.

A felső görbe véletlen, az alsó pedig az $\langle 110 \rangle$ irányú beesés spektrumát mutatja. A véletlen komponens akkor kapták, ha a beeső sugár nem esett egybe semmilyen kristálytani iránnyal. Ezen részecskék eloszlását statisztikusan független eltérések sorozata eredményezi, alakja mint az ábrából is kitűnik, Gauss görbe.

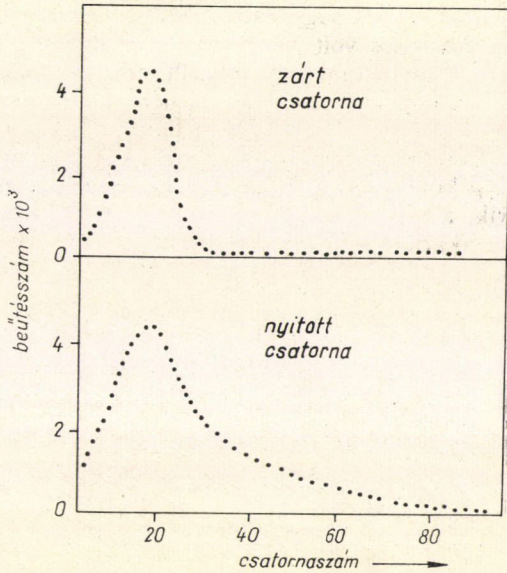
A csatornán keresztüljutott részek spektrumában viszont egy nagyenergiás farok figyelhető meg, utalva arra, hogy a csatornában haladó részecskékre kisebb a fékező képesség.

Appleton szisztematikus energia-vesztés vizsgálatokat végzett gyémántrácsú félvezetőkön, kis indexű síkok mentén [16].

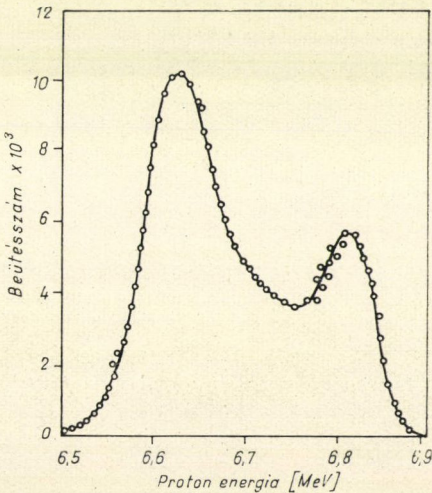
Tipikus energia spektrum Si $\{111\}$ irányára 7 MeV protonokra a 10/a ábrán látható.

A spektrum érdekesen alakult a dekomponálás után (10/b) ábra. Ha a normál energiavesztésű tartományt (szaggatott vonal) leválasztjuk, a kisvesztésű komponens (B) kisenergiájú oldalán egy vállat láthatunk. Ezenkívül megjelent egy anómálisan nagyenergiavesztésű csúcs is (A).

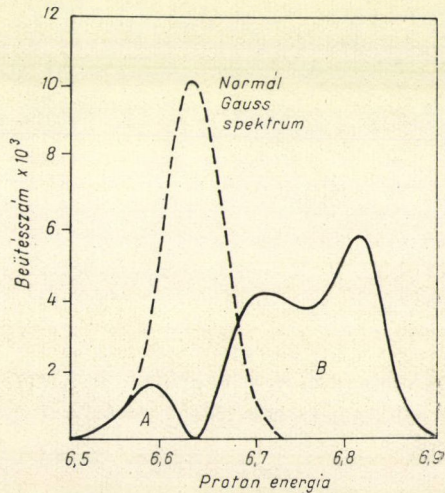
Megvizsgálták az egyes összetevők orientáció függését is és azt tapasztalták, hogy



9. ábra



10/a ábra

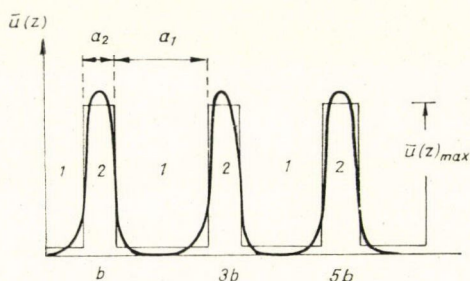


10/b ábra

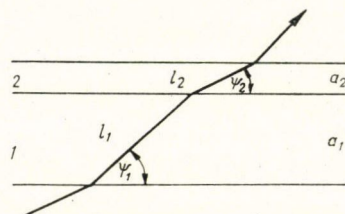
a normál és a nagyveszteségű csúcs egyaránt minimumot mutat, amikor az ionsugár párhuzamos volt az $\{111\}$ iránnyal.

Ismertettünk egy modellt, amely *Thompson*tól származik [24], és amely néhány drasztikus egyszerűsítés ellenére kielégítően magyarázza a fenti megfigyeléseket.

A 2.2-ben utaltunk rá, hogy a síkokkal határolt csatorna helyettesíthető egy effektív potenciállal, amely a lapok közötti távolság függvénye. Mivel ez a potenciál az a_{TF} környékén gyorsan változik, további egyszerűsítésként négyszöggel helyettesítjük, amelynek nagysága $U(Z)_{\max}$ és periódus állandója b . Legyen a_1 a völgy és a_2 az akadály hossza (11/a ábra).



11/a ábra



11/b ábra

Az ionsugár áthatolása ilyen periodikus potenciálon úgy tárgyalható, mint a fénytörés különböző törésmutatójú, közegek határfelületén (11/b ábra).

Ha $\psi_2 \rightarrow 0$ teljes visszaverődés következik be és az idetartozó $\psi_1 = \psi_S$ szög a (17.) kritikus szög.

Azok az ionok, amelyek az ① tartományba $\psi < \psi_S$ szöggel lépnek be, nem hatolhatnak át a ②-be, hanem a potenciálfalról visszaverődnek és a csatornában mozognak tovább.

Azok viszont, amelyekre a ψ csak kicsivel nagyobb, mint a ψ_S , nagy elhajlást szenvednek és ennek következtében igen sokáig tartózkodnak a nagy elektronsűrűségű ② rétegben. Ezek a trajektóriák alkotják az anomálsan nagyveszteségű komponenszt.

Azok a trajektóriák viszont, amelyekre $\psi_1 \gg \psi_S$ kevésbé hajolnak el és így az egyes tartományokban megtett út lényegében az a_1 és a_2 hosszakkal arányos. Ezek alkotják a normális energiaveszteségű komponenszt.

A fenti kép még nem teljes. Nem ad számot a kisenergia veszteségű (channeling) csúcs kiszélesedéséről.

Ehhez a jelenséghez figyelembe kell venni a kristály hőmozgását, amely mintegy elmossa a csatorna falakat, definiálhatatlanná teszi a $\psi_1 \sim \psi_S$ szögtartománybeli ion pályákat.

Az olyan szögeknél, ahol $\psi_1 \cong \psi_S$ az orientálatlan nyalábban mozognak, de bizonyos valószínűséggel bekövetkezik az az eset, hogy egy részük a csatornába szóródik és fordítva, channelizált részecske kiszóródhat a véletlen nyaládba. Ez a

channeling \leftrightarrow véletlen

oda-vissza történő átmenet okozza a (B) csúcs kiszélesedését. Az átmenetek valószínűsége a hőmérséklettel és a kristály vastagságával növekszik.

A különböző csatornák kölcsönhatását először *Dearnaley* és *Sattler* észlelte [22], majd részletesen *Appleton* és munkatársai vizsgálták. 4,85 MeV energiájú protonokkal szilíciumon {111}, {110} és {100} síkok, valamint az $\langle 110 \rangle$ tengely irányában megmérték az energiaveszteséget. Megmutatták, hogy az $\langle 110 \rangle$ irányú energiaveszteség rekonstruálható a fenti, tehát a tengelyt metsző síkoknál mért értékekből, azon az alapon, hogy axiális csatornában mozgó részecske nem marad végig ugyanott, hanem csatornáról csatornára vándorol.

3.4 Visszaszórás

A nagyszögű Rutherford visszaszórás a dechannelingen alapul. Előnye a nagy hatáskeresztmetszet és az, hogy nincs megkötés a részecske típusára, energiájára és a target vastagságára, mint a transzmissziónál.

Amikor az ionsugár egybeesik valamelyik kis indexű atomsor, vagy sík tengelyével, a visszaszórás valószínűsége csökken, az intenzitásban minimumot kapunk.

A target különböző mélységéből visszaszóródó ionok különböző energiával rendelkeznek (l. 4.1). Ezért ha az energia spektrumból kivágunk egy rést, vékony felület alatti zónákat vizsgálhatunk.

A 12. ábrán látható görbéket szilícium $\langle 111 \rangle$ irányú proton bombázásával kapták [29]. Az ① 900 Å a ② 6000 Å mélységnek felel meg.

Fontos paramétere a fenti görbéknek a félértékszélesség, amely

$$\psi_{1/2} = \alpha \psi_K \quad (39)$$

szerint kapcsolódik a kritikus szöghöz.

Az α csak a rácsatomok rezgési amplitúdójától függ (ϱ). A $\varrho/\psi_K d > 1$ tartományban [29]:

$$\alpha = \left[\frac{1}{2} \ln \left(1 + \frac{3a_{TF}^2}{\varrho \ln 2} \right) \right]^{1/2} \quad (40)$$

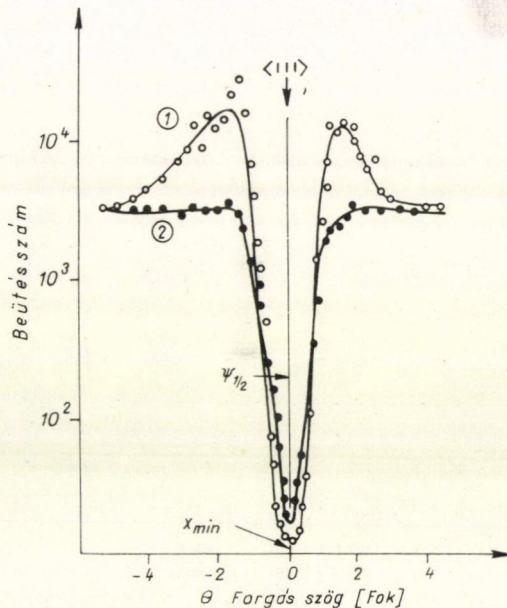
nagyságrendileg 0,8—1,6.

A mért és a (11), (39)-ből számolt értékek jó egyezést mutatnak. (2. táblázat.)

A visszaszórásnál közvetlenül mérhető a dechannelinget jellemző x mennyiség:

$$x = \frac{\text{orientált hozam}}{\text{véletlen beesés intenzitása}} = \frac{y_A(\psi=0)}{y_R(\psi>\psi_K)} \quad (41)$$

Tulinov [27] Rutherford-szórással vizsgálta a blocking effektust 200 keV között úgy, hogy a 6/a ábrán látható elrendezésben a detektor helyére fotoemulziót helyezett és a kristályt az emulzió irányába orientálta. Blocking irányból a részecskék vissza-



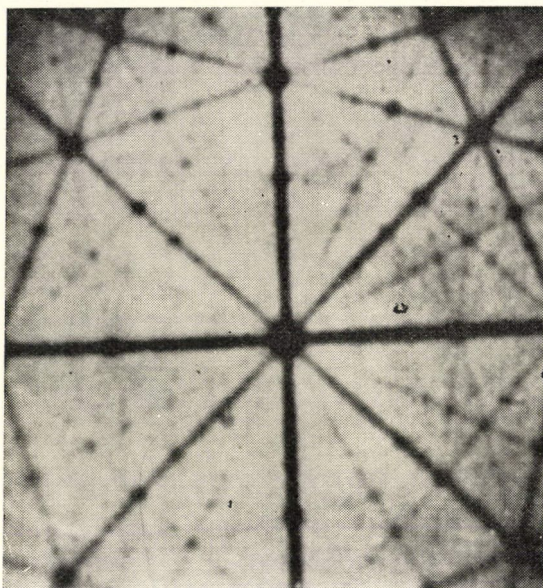
12. ábra

2. TÁBLÁZAT

A kísérleti és az elméleti értékek a kritikus szögre 400 keV protonokra Ta-ban

Irány	$\langle 100 \rangle$	$\langle 311 \rangle$	$\langle 211 \rangle$	$\langle 511 \rangle$
Elméleti	2,1°	1,4°	1,1°	1,0°
Kísérleti	2,0°	1,2°	0,9°	0,9°

szóródtak és világos foltot hagytak a lemezen, channeling irányból kevés részecske érkezik és a film sötét marad. A 13. ábrán $W\langle 100 \rangle$ irányú blocking képét látjuk. Jól kivehetők a kristály szimmetria tengelyei.



13. ábra

3.5 Channeling vizsgálatok magreakciók segítségével

A magreakciókkal végzett mérés, akárcsak visszaszórás, a dechanneling felhasználásával történik. Az első ilyen természetű kísérletet *Thompson* [33] végezte Cu^{65} (p, n) Z^{65} reakción 2,8 MeV-es protonokkal. A reakció küszöbenergiája ebben az esetben 2,1 MeV. Azok a protonok, amelyek a csatorna mentén mozognak és ott lecsökken az energiájuk a küszöb alá, kicsiny valószínűséggel okoznak magreakciót, ezért a neutronhozam csökkenésére számítottak. A neutronok intenzitása valóban csökkent, amikor a protonok az $\{110\}$ és $\{001\}$ síkok mentén haladtak, de csak 5%-kal. Mivel a 2,8 MeV-es protonok kb. 30 μ -t tesznek meg rézben amíg elérik az energiaküszöböt, a viszonylag kicsi effektus annak köszönhető, hogy ilyen nagy távolságon erősen megnő a kiszökés valószínűsége a csatornából.

Sokkal nagyobb effektust figyelt meg *Bogh*, amikor Al^{27} és Si^{29} (p, γ) reakciókat

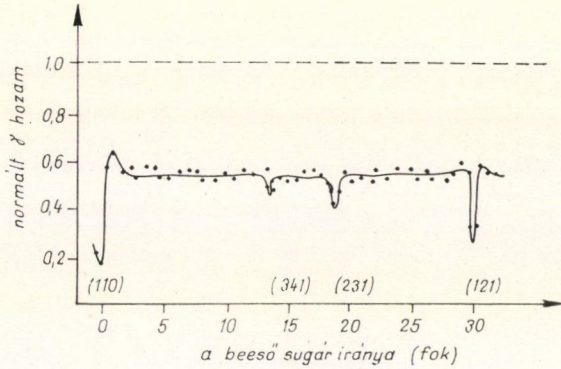
vizsgálta. Mindkettő éles rezonancia a 400 keV-es tartományban. A rezonancia jelleg miatt erősen korlátozott az a mélység, ahol a reakció bekövetkezik. Az energia változtatásával pedig változtatni lehet a reakció zóna mélységét. 410 keV protonokkal bombázva az alumínium egykristályt (pár keV-el a rezonancia fölött) a $\langle 101 \rangle$ tengely mentén, a γ hozam ötödére csökkent.

Növekedett viszont abban az esetben, ha a protonok energiáját növelték annak megfelelően, hogy a reakciózóna egyre mélyebbre került.

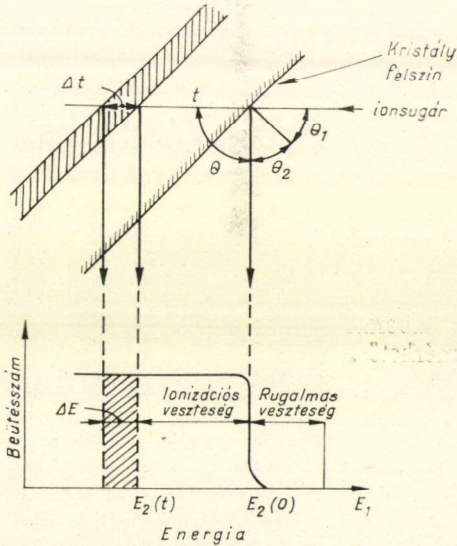
Az alumínium vizsgálatát Andersen folytatta az Al^{27} 1380 keV körüli két rezonanciájával. A gamma hozamban tízszeres gyengülést talált a $\langle 110 \rangle$ irány és 1–2-szerest a kis indexű síkok mentén. Az utóbbiakat látjuk a 14. ábrán.

A mélység függvényében vizsgálva a (p, γ) reakciót, azt találta, hogy a csatornában mozgó részecskék száma exponenciálisan csökken.

Az $\langle 110 \rangle$ irányban a mélyülés félérték sebessége $0,8^\circ$ volt, ami jól egyezik (11)-ből számítható $1,1^\circ$ kritikus szöggel.



14. ábra



15. ábra

4. Kristályhibák és szennyezések vizsgálata channelinggel

4.1 Kristályhibák

Vizsgáljuk meg először polikristályos mintáról visszaszóródott részecskék energia spektrumát (15. ábra). Monoenergius E_1 , M_1 tömegű részecskék belépnek M_2 tömegű atomokból álló rácsba θ_1 szöggel a felülethez képest. A laboratóriumi rendszerben θ szöggel szóródott és a kristályt θ_2 szöggel elhagyó részecskék energiaanalízisét végezzük el.

A felületről szóródott részecskék energiája: [36], [37]

$$E_2(t=0) = k^2 E_1, \quad (42)$$

$$\text{ahol} \quad k = \frac{M_1 \cos \theta}{M_1 + M_2} + \left\{ \left(\frac{M_1 \cos \theta}{M_1 + M_2} \right)^2 + \frac{M_2 - M_1}{M_1 + M_2} \right\}^{1/2} \quad (43)$$

A k értéke szilíciumra protonok esetén, ha $\theta = 90^\circ$, $k_{Si} = 0,93$. A $\Delta E(t=0) = E_1 - k^2 E_1$ a rugalmas energiaveszteség. A t mélységből visszaszóródott ionok három részletben veszítenek energiájukból. Fékeződnek oly módon, hogy ionizálják, illetve gerjesztik a target atomjait a szóródás előtt és utána, t , ill. $t \frac{\cos \theta_1}{\cos \theta_2}$ úton, valamint a t mélységben a nagyszögű szórásnál a (42) alapján.

Ha $S(E) = \frac{1}{N} \frac{dE}{dx}$ a fékező képesség, ahol N a köbcentiméterenkénti atomszám, a t mélységből érkező ionok energiája:

$$E_2(t) = k^2 \left[E_1 - \int_t^0 S(E) dt \right] - \int_0^{t \frac{\cos \theta_1}{\cos \theta_2}} S(E) dt \quad (44)$$

Kis mélységekben az $S(E)$ gyakorlatilag állandó, ezért (44) a következőképpen közelíthető:

$$E_2(t) \approx k^2 E_1 - t \left[S(E_1) k^2 + S(E_2) \frac{\cos \theta_1}{\cos \theta_2} \right] \quad (45)$$

A (45) jelenti az energia-mélységskála transzformációt. Ha a készülék energia felbontása ΔE , akkor

$$\Delta E = \Delta t \left[S(E_1) k^2 + S(E_2) \frac{\cos \theta_1}{\cos \theta_2} \right] \quad (46)$$

adja a mélységfelbomlást. A (45) és (46) segítségével az $y_n(E)$ intenzitásból meghatározható a t mélységből származó $y_n(t)$ szóráshozam:

$$y_n(t) \Delta t = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right) \Omega N \Delta t \quad (47)$$

ahol Ω a detektor térszöge és $\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)$ a Rutherford szórás hatáskeresztmetszete a laboratóriumi rendszerben. Ha a target vastagsága T elegendően kicsiny, összemérhető Δt -vel az integrális hozam:

$$I_n = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right) \Omega N T \quad (48)$$

Az n index a fentiekben a „normál” esetet, a véletlen beesés irányát jelöli, megkülönböztetve a channelingtól. Ha a beeső nyaláb channeling irányban éri a kristályt, visszaszórást csak a dechanneling okoz. Ekkor a szóráshozam $x, (t)$ részére csökken, ahol $x, (t) = \pi a_{TF}^2 N d$ ideális kristályra. Ezért

$$y_A(\psi=0, t) \Delta t = x, (t) y_n(t) \Delta t. \quad (49)$$

Ha a kristályatomok egy része a_{TF} -nél nagyobb távolságra elmozdul az egyensúlyi rácshelyről, kölcsönhatnak az orientált sugárzással. Következésképp $y'_A(t) \neq y_A(t)$ és az $y'_A(t)$ -ből meghatározható az $N(t)$ hibakoncentráció:

$$y'_A(t) = y'_n(t) \left[x_R(t) \frac{N - N'(t)}{N} + \frac{N'(t)}{N} \right] \quad (50)$$

ahol $\frac{N(t)}{N}$ a t mélységben található hibahelyek relatív száma. A $x_R(t)$ a „helyén maradt atomok” dechanneling járulékát jellemzi. Ha $x'_1(t) = \frac{y'_A(t)}{y'_n(t)}$ akkor (50)-ből

$$N'(t) = N \frac{x'_1(t) - x_R(t)}{1 - x_R(t)} \quad (51)$$

A $x_R(t)$ függvényt *Feldmann* [39] javaslatára írhatjuk:

$$x_R = x_1 + [1 - x_1] \exp(-\gamma(t)), \quad (52)$$

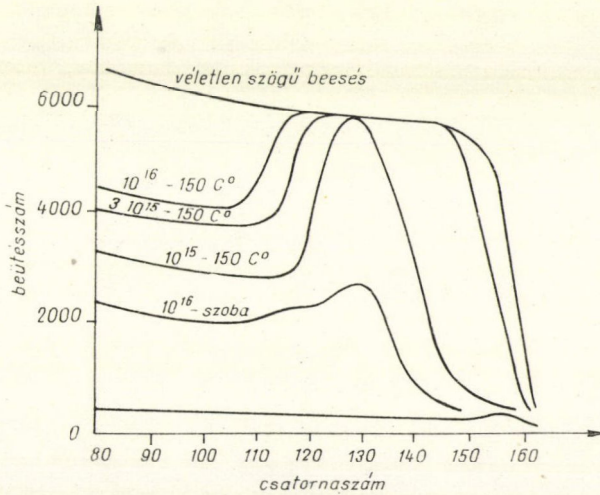
ahol $\gamma(t) = \int_0^t P(\psi_K, t) N'(t) dt$. A $P(\psi_K, t) N'(t) dt$ annak a valószínűsége, hogy a részecske az orientált nyalábból kiszóródik a hibacentrumokról. Látszik, hogy $N'(t)$ kiszámítható $y'_n(t)$, $y'_A(t)$ és $\gamma(t)$ ismeretében.

Sajnos a $P(\psi_K, t)$ függvényt csak két határesetben lehetséges kiszámítani. Az egyik az, amikor a dechanneling egyetlen eltérülés idézi elő, vagyis a részecske $\psi \gg \psi_K$ szöggel szóródik (gyengén szennyezett anyag).

A másik az, amikor a dechanneling sokszoros szórás eredménye, amelyek mindegyike $\psi < \psi_K$ szöggel történik, de az eredőjük már nagyobb, mint a kritikus szög. A közbülső esetre a $P(\psi_K, t)$ nem áll rendelkezésünkre. E nehézség nagy részben elkerülhető, ha a mérendő kristályt kettősen orientáljuk. Ez azt jelenti, hogy mind a beesés, mind a detektálás iránya ugyanaz a csatorna. Ekkor $x_R \sim 0$ praktikusán [36], így az (50) sokkal egyszerűbbé válik:

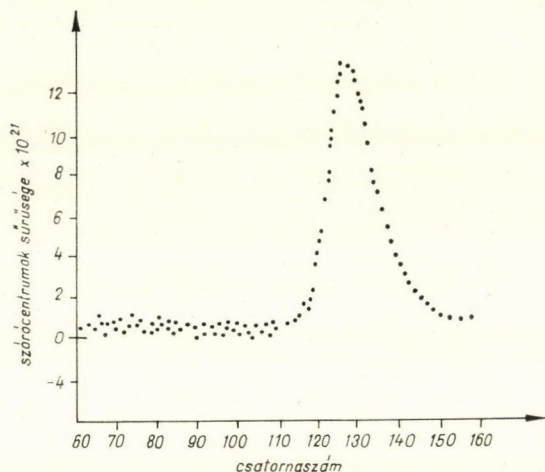
$$y'_A(t) = y'_n(t) \frac{N'(t)}{N} \quad (53)$$

Az $\frac{y'_A}{y'_n}$ hányados közvetlenül a hibahelyek relatív számát adja a mélység függvényében.



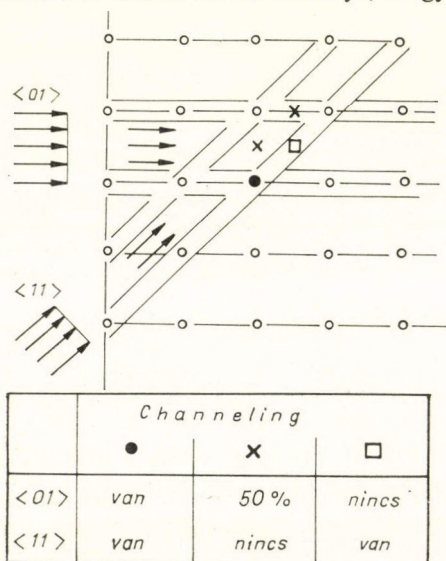
16/a ábra

A 16/a ábrán implantációs úton bórral szennyezett szilícium energia spektrumát látjuk: A legfelső görbe a véletlen beesési irányra vonatkozik, a többi pedig az $\langle 110 \rangle$ irány mentén végzett analízis eredményét mutatja különböző szennyezés dózis és implantációs hőmérséklet mellett.



16/b ábra

hordozó kristály folytonos spektruma ($k_{\text{alap}} < k_{\text{szennyező}}$). A 17. ábrán antimonnal implantált Si kristály spektrumát látjuk a véletlen és az $\langle 110 \rangle$ irányú beesés segítségével analizálva. Az antimonra jellemző csúcs az orientált spektrumban erősen csökken. Ez annak következménye, hogy az antimon atomok mintegy 80%-ban izolált szubsztitúciós helyre kerültek és csak a fennmaradó rész helyezkedett el, mint intersticiális. Dechannelinget csak utóbbiak idézik elő.



17. ábra

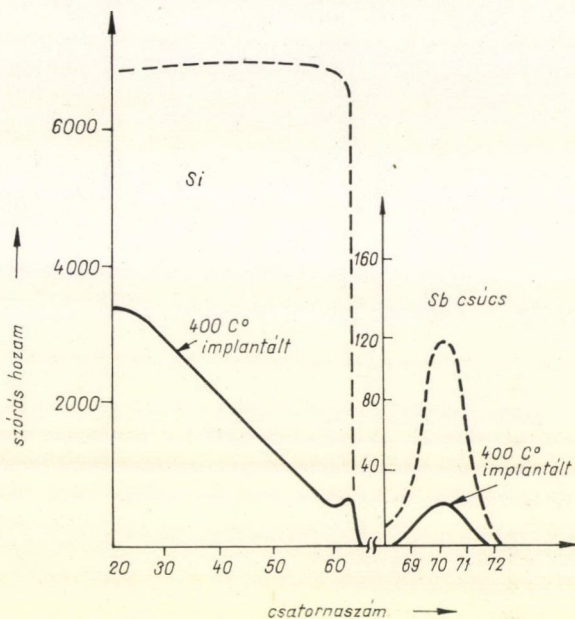
4.2 Idegen atomok lokalizálása

A nagyszögű visszaszórás segítségével kimutatható az alaplátrixnál nagyobb tömegű szennyezők elhelyezkedése a kristályban. Ebben az esetben (42) és (43) értelmében az idegen atomok profilját jellemző csúcs nagyobb energiákon jelenik meg, mint a

Ha a visszaszórást több irányból is megfigyeljük, az is meghatározható, hogy a szennyezők milyen rácshelyre épülnek be. Ezt a módszert látjuk a 18. ábra egyszerűsített kétdimenziós modelljén, ahol X, □ és ● jelzésekkel reprezentáltuk a leggyakoribb szennyezés típusokat. Mivel az intersticiális helyen ülő atomok kölcsönhatnak az orientált sugárral (pl. □ az $\langle 01 \rangle$ és x az $\langle 11 \rangle$ mentén), az ilyen irányokban megszűnik a channeling. Ha a szennyező teljes egészében szubsztitúciós helyen található, a visszaszórás valamennyi irányban csökken. Az x jelű szennyezők fele intersticiális, fele pedig rácshelyre ül, ahol a kristályatomok által leárnýékolódik, így az $\langle 01 \rangle$ irányból 50% channelinget kapunk.

Az alaplátrixnál könnyebb szennyezők ezen az úton nem vizsgálhatók, mivel a visszaszórt részek spektrumában a karakterisztikus csúcs eltűnik a folytonos háttérben.

Az ilyen típusú szennyezők magreakciók segítségével lokalizálhatók, mint $^7\text{Li}(p\alpha)^4\text{He}$ és $^{11}\text{B}(p\alpha)^8\text{Be}$ esetében történt [30].



18. ábra

4.3 Felületi szennyeződések és amorf rétegek.

Meghatározható a réteg összetétele és sűrűsége a mélység függvényében, valamint a teljes rétegvastagság is. Töltött részecskék visszaszóródása és channelinggé lehetőséget nyújt amorf réteggel borított egykristályok roncsmentes vizsgálatára.

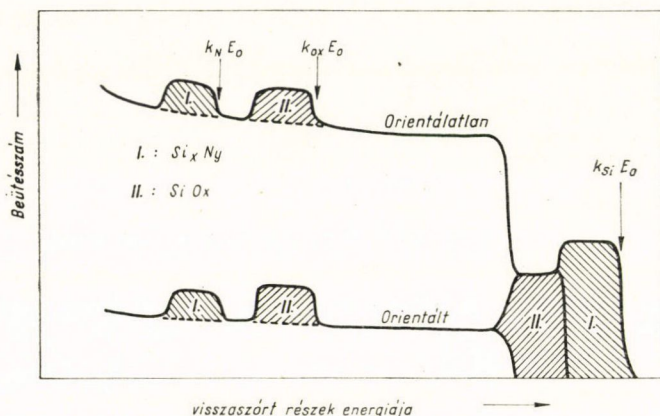
Bogh [40] kimutatta, hogy felületi hibák és amorf réteg híján tökéletesen orientált nyalábra is jelentkezik egy, a felületre jellemző csúcs a visszaszórt részek spektrumában.

A beeső sugárzás ugyanis a felületen ütközik az első atomi réteggel, amely árnyékolatlan és így normál hozamot ad. Az alsóbb rétegekben a megmaradt ionok nagy része csatornába kerül és visszaszórás csak a dechannelingtől származik, tehát erősen csökken.

Ha a szennyezők kis koncentrációban abszorbeálódtak a felületen és ezen kívül lokálisan helyezkednek el az alapkristály atomjaihoz képest, akkor felszínről származó csúcs növekszik. Ez teljesen analóg azzal az esettel, amikor a szennyezők belül helyezkednek el a rácsban, csak a szerepük most megcserélődött. Abban az esetben ugyanis a rácsatomok voltak leárnyékolva a szennyezők által, a felületen a szennyezőket árnyékolják le a rácsatomok.

E technika érzékenységét még nem vizsgálták, de az látszik, hogy 0,1 monoréteg kielégítően detektálható.

Nehézséget jelent, hogy a mérésekhez 10^{-9} , úgynevezett „ultrahigh” vákuum szükséges, hogy a felület tisztaságát megőrizzék, és ami a leglényegesebb, a mintát ugyanilyen vákuumban kell megtisztítani.



19. ábra

Ha a felületi szennyezés koncentráció nagy, mint pl. szilíciumon SiO_2 , illetve Si_3N_4 , vagy pedig keverékük amorf réteg formájában, elegendő a szokásos 10^{-4} – 10^{-5} vákuum. A visszaszórt ionok spektrumában megjelenik az oxigén és nitrogén karakterisztikus csúcs is mintegy reáülve a szilícium folytonos spektrumára.

Ez látható a 19. ábrán, ahol az I. csúcs a nitrogénre, a II. pedig az oxigénre vonatkozik. A spektrum elején levő I. és II. csúcs pedig a Si_xN_y és SiO_x vegyületekben levő szilícium mennyiségét jelenti, a csúcsok aránya pedig a sztöchiometriai összetételt adja meg [42].

Ezen az úton határozták meg Gyulai és munkatársai [43] a SiO_2 és Si_3N_4 vegyületek fékező képességét az α részecskékre.

KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS

Ezúton szeretnék köszönetet mondani Keszthelyi Lajosnak, a fizikai tudományok doktorának a téma többszöri, alapos megvitatásáért, a kézirat elolvasásáért és értékes megjegyzéseiért.

IRODALOM

1. *Robinson, Owen*, Appl. Phys. Lett. 2, 30, 1963.
2. *Piercy, Davies*, Phys. Rev. Lett. 10, 399, 1963.
3. *Lutz, Sizmann*, Phys. Lett. 5, 113, 1963.
4. *Bohr*, Kgl. Danske Vid. Sels. Mat. Fys. Medd 18, No 8, 1948.
5. *Linhard—Schaff*, Kgl. Danske Vid. Sels. Mat. Fys. Medd 33, No 14, 1963.
6. *Datz*, Ann. kev. Nuc. Sci. 17, 129, 1967.
7. *Linhard*, Phys. Rev. Lett. 12, 126, 1964.
8. *Linhard*, Kgl. Danske Vid. Sels. Mat. Fys. Medd. 34, No 14, 1965.
9. *Gombás*: Az atommag statisztikus elmélete.
10. *Tulinov*, Szov. Fiz. Uszp. 8, 864, 1966.
11. *Uggerhøj*, Can. J. Phys. 46, 543, 1968.
12. *Eisen*, Can J. Phys. 46, 561, 1968.
13. *Nelson, Thompson*, Phil. Mag. 8, 1677, 1963.
14. *Dearnaley, Wilkins*, J. Sci. Instr. 44, 880, 1967.
15. *Dearnaley at al*, Can. J. Phys. 46, 587, 1968.
16. *Appleton, Erginsoy*, Phys. Rev. 161, 330, 1967.
17. *Erginsoy*, Proc. of Internac. Conf. on Solid State Phys. Res. with Accelat. 31. old., **Brook-**
haven, 1967.
18. *Brice*, Phys. Rev. 165, 475, 1968.
19. *Satler*, Phys. Rev. 175, 526, 1969.
20. *Nozieres, Pienes* il Nuovo Cim. 9, 470, 1958.
21. *Nelson*, The Observation of Atomic Collisions North-Holland. 1968.
23. *Appleton*, Phys. Rev. 19, 185, 1965.
24. *Thompson*, Proc. of Internac. Conf. on Solid State Phys. Res. with. Acc. 106. old. **Brook-**
haven 1967.
25. *Picraux*, Scientific Rep. Cal. Inst. Techn. Nol. 1969.
26. *Bøgh, Uggerhøj*, Phys. Letters 17, 116, 1965.
27. *Tulinov*, Uszp. Fiz. Nauk. 87, 585, 1965.
28. *Erikson at al*, Appl. Phys. Lett. 10, 323, 1967.
29. *Picraux at al*, Phys. Rev. 180, 873, 1969.
30. *Erikson at al*, Can. Nucl. Techn. 5, 40, 1966.
31. *Andersen*, Nucl. Instr. Met. 38, 238, 1965.
32. *Birkman*, J. Appl. Phys. 25, 961, 1954.
33. *Thompson*, Phys. Rev. Lett. 13, 304, 1964.
34. *McCaldin*, Nucl. Instr. Meth. 38, 153, 1965.
35. *Lindhard*, Nucl. Phys. A96, 481, 1967.
36. *Bøgh*, Can. J. Phys. 46, 653, 1968.
37. *Bøgh*: Proc. Int. Conf. Sol. State Phys. (76. oldal). Brookhaven. 1967.
38. *Dearnaley*, Rep. Prog. Phys. 32, 405 (1969).
39. *Eisen et al*: Atomic Coll. Phen. in Solids, ed Thompson, North-Holland (1970).
40. *Bøgh*, Phys. Rev. Lett. 19, 61, 1967.
41. *Feldmann*, Appl. Phys. Lett. 15, 305, 1969.
42. *Gyulai at al*, Appl. Phys. Lett. 17, 332, 1970.
43. *Gyulai at al*, Appl. Phys. Lett. 16, 232, 1970.
44. *Götz*, Exp. Tech. der Phys. 19, 233, 1970.
45. *Meyer et al*, Appl. Phys. 41, 4166, 1970.
46. *Kaminsky*, Phys. Rev. Lett. 23, 819, 1969.
47. *Lindhard*, Kgl. Danske Vid. Selsk. Mat.-Fys. Medd. 28, No 8, 1954.
48. *Andersen*, Kgl. Danske Vid. Selsk. Mat.-Fys. Medd. 36, No 7, 1967.
49. *Bøgh*, Proc. Roy. Soc. A311, 35, 1969.
50. *Erginsoy*: Interaction of Rad. Solidides. ed. Bishay Plenum. Press, New York, 1967..
51. *Altman et al*, Phys. Lett. 32A, 423, 1970.

KÜLÖNBÖZŐ LCAO MO MÓDSZEREK ÁLTALÁNOSÍTÁSA PERIODIKUS POLIMEREK ELEKTRONSZERKEZETÉNEK VIZSGÁLATÁRA*

LADIK JÁNOS

MTA Központi Kémiai Kutató Intézete, Budapest

I. Bevezetés

A polimerek kémiai és fizikai sajátosságainak vizsgálata mind a műanyagkémia, mind a molekuláris biológia szempontjából egyre növekvő jelentőségű. Ezért időszerűnek látszott megfelelő olyan módszereket kidolgozni, amelyek lehetővé teszik tetszőleges periodikus polimerek elektronszerkezetének vizsgálatát. Ha ugyanis egy polimer elektronszerkezete kellő pontossággal ismert, ennek alapján különböző jellemző fizikai és kémiai paraméterei a statisztikus mechanika segítségével már meghatározhatók. Feltéve, hogy definiálható a polimerben egy elemi cella, amelynek ismétlésével a polimer felépíthető, kvantumkémiai és szilárdtestfizikai módszerek kombinálásával meg lehet konstruálni az egész periodikus polimer elektronszerkezetének vizsgálatára alkalmas módszereket is.

A műanyagkémiaiban fontos szerepet játszó egyes polimerek, például a poli-etilén-oxid periodikus szerkezetű. Definiálható elemi cella az izotaktikus sztereo-specifikus polimerekben is (például az izotaktikus poli-propilén, illetve a szindiotaktikus poli-propilén). Ugyanakkor nem szigorúan periodikus polimerek (például poli-sztirol) elektronszerkezetére is hasznos felvilágosítást adhat a megfelelő periodikus polimer (pl. periodikus poli-sztirol modell) energiasávjainak vizsgálata.

Hasonló a helyzet a biopolimereknél is. Periodikus biopolimerek (pl. periodikus poli-szaharidok, így a keményítő vagy a cellulóz) elektronszerkezete a kidolgozott módszerekkel — megfelelő elektronikus számítógép kapacitás rendelkezés állása esetén — minden további nehézség nélkül vizsgálható. Ugyanakkor nem periodikus biopolimerek (pl. a DNS, vagy a fehérjék) elektronszerkezetére ismét igen hasznos felvilágosítást nyújthat a megfelelő periodikus modellek (különböző periodikus DNS és fehérje modellek) energiasávjainak meghatározása. Megjegyzendő, hogy a közel periodikus rendszereknél (pl. a DNS) a szigorúan nem periodikus polimer elektronszerkezetének vizsgálatára szolgáló, egyre inkább fejlődő módszerek sok esetben a megfelelő periodikus polimer modellekre végzett sávszámítás eredményeit használják fel kiindulásul [1].

Kitűzött célunk tehát az volt, hogy a Born-Oppenheimer közelítést alkalmazva (tehát a polimerben az atommagok helyzetét ismertnek tételezve fel), az elemi cellában tetszőleges számú atompályát tartalmazó periodikus polimer elektronszerkezetének vizsgálatára alkalmas módszereket dolgozzunk ki, mind egy-, mind két- és háromdimenziós periodikus polimerekre. A módszereket mind *ab initio* [2], mind különböző szemiempirikus (csak π -elektronokat figyelembe vevő Pariser-Parr-Pople (P-P-P) módszer [3, 4], az összes vegyértékelektronokat (σ - és π -elektronokat) vizsgáló CNDO, illetve INDO módszerek [5, 6]) formájukban fejlesztettük ki.

* 1970-ben kibővített tézisek és mellékelt dolgozatok formájában benyújtott, és 1971-ben sikerrel megvédett doktori értekezés kibővített tézisei.

Legújabbban a Martino és a szerző által kidolgozott extended Hartree-Fock (különböző pályák különböző spinekre spinproiccionálással a variálás előtt) módszert is általánosítani tudtuk periodikus polimerekre. Az utóbbi általánosítást ismét mind *ab initio*, mind a P-P-P és CNDO szemiempirikus változatban elvégeztük (*ab initio*, P-P-P és CNDO extended Hartree-Fock LCAO kristálpálya módszerek).

Megemlítenéd, hogy a kidolgozott különböző LCAO kristálpálya módszerek szerves molekulakristályokra és kellően nagy bázisfüggvényrendszer használata esetén minden valószínűség szerint fémkristályokra is alkalmazhatók lesznek. Ezért a polimerkémia és a molekuláris biológia területén túlmenően a szilárdtestfizika szempontjából is érdeklődésre tarthatnak számot.

II. Eredmények

1. A különböző LCAO MO módszerek használatakor molekulák esetén (ha az átfedést nem hanyagoljuk el), mint ez jól ismert,

$$HC_i = \varepsilon_i SC_i \quad (1)$$

alakú mátrix-egyenletet kapunk. A polimert vagy kristályt egyetlen óriási molekulának tekintve az (1) egyenlet érvényes ezekre a rendszerekre is, de a **H** Hamilton-mátrix és az **S** átfedési mátrix dimenziója igen nagy lesz, illetve a végtelenhez tart, ha a figyelembe vett atompályák (AO-k) száma igen nagy, illetve tart a végtelenhez. Ha a szóban forgó rendszerben definiálható elemi cella, a **H** és **S**-mátrixok almátrixokból épülnek fel.

$$H = \begin{pmatrix} \begin{array}{|c|c|c|} \hline 0 & 1 & 2 \\ \hline \end{array} & \dots & \begin{array}{|c|c|} \hline N-1 & N \\ \hline \end{array} \\ \begin{array}{|c|c|c|} \hline -1 & 0 & 1 \\ \hline \end{array} & \dots & \dots \\ \begin{array}{|c|c|c|} \hline -2 & -1 & 0 \\ \hline \end{array} & \dots & \dots \\ \vdots & & \\ \begin{array}{|c|c|} \hline -N & -(N-1) \\ \hline \end{array} & \dots & \dots \end{pmatrix}, \quad (2)$$

ahol a **0** almátrix az elemi cellán belüli kölcsönhatásokat tartalmazza, az **1** és **-1**, **2**, **-2** stb. almátrixok pedig a jobb és bal oldali első, második stb. szomszédal való kölcsönhatás almátrixai. (Itt egyszerűség kedvéért lineáris lánc esetére korlátozzuk magunkat, de hasonló módon megkaphatók az alább ismertetett eredmények 2- vagy 3-dimenziós periódusos rendszer esetén is.) Ha bevezetjük a szilárdtestfizikában szokásos Born-Kármán periodikus határfeltételt, amelynek következtében $\begin{bmatrix} -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} N \end{bmatrix}$, $\begin{bmatrix} -2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} N-1 \end{bmatrix}$, stb. ($N+1$ az elemi cellák száma a láncban), a (2) mátrixok ciklikus hipermátrixok lesznek, amelyek egy **U** unitér mátrixsal végzett transzformáció segítségével blokkdiagonalizálhatók:

$$H' = U^+ H U, \quad S' = U^+ S U \quad (3)$$

[I]. (Az U mátrix konkrét alakjára 3-dimenziós esetben Biczó Géza adott meg egy kifejezést [I].) Az unitér transzformációt alkalmazva (1)-re kapjuk, hogy

$$U^+ H U U^+ C_i = \varepsilon_i U^+ S U U^+ C_i, \quad (4)$$

illetve az $U^+ C = D_i$ jelöléssel és (3) figyelembevételével:

$$H' D_i = \varepsilon_i S' D_i. \quad (5)$$

Mivel H' és S' blokkdiagonális hipermátrix, az (5) egyenlet szétesik az egyes n -dimenziós alalmátrixok (n a figyelembe vett AO-k száma az elemi cellán belül)

$$H(k) d_i(k) = \varepsilon_i(k) S(k) d_i(k) \quad (6)$$

egyenleteire, ahol k hullámszám

$$\left(k = \frac{2\pi p}{a(N+1)}; p = -\frac{N}{2}, -\frac{N}{2} + 1, \dots, -1, 0, 1, \dots, \frac{N}{2} \right)$$

a $\left(-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}\right)$ intervallumban folytonos változónak tekinthető, ha $N \rightarrow \infty$. A részletes levezetés szerint [I]

$$H(k) = \sum_{q=-\infty}^{+\infty} e^{ikqa} H(q), \quad S(k) = \sum_{q=-\infty}^{+\infty} e^{ikqa} S(q), \quad (7)$$

ahol a az elemi transláció és a hermitikus $H(q)$, ill. $S(q)$, mátrixok az eredeti (2) mátrixok q -adik szomszéd kölcsönhatást megadó alalmátrixai.

Megjegyzendő, hogy a translációs szimmetria és a Born-Kármán periodikus határfeltétel felhasználásával a szilárdtestfizikában jól ismert LCAO (tight binding) kristálypálya módszer eddig is az elemi cellában levő AO-k számával azonos dimenziójúra redukálta a problémát. Azonban a levezetést nem végezték mátrix formalizmus felhasználásával és így csak a cellán belüli egy-két AO esetére oldották meg a problémát, míg a vázolt módon — hermitikus komplex mátrixokat alkalmazva — a probléma n bármely értéke mellett kezelhetővé vált.

2. A (6) egyenletből, amint azt G. Del Re-vel együtt megmutattuk [I], a komplex $S(k)$ mátrix kiküszöbölhető. Az eredményül kapott

$$\hat{H}(k) \hat{d}_i(k) = \varepsilon_i(k) \hat{d}_i(k) \quad (8)$$

egyenlet, ahol

$$\hat{H}(k) = S^{-1/2}(k) H(k) S^{-1/2}(k), \quad \hat{d}_i(k) = S^{+1/2}(k) d_i(k), \quad (9)$$

már egyszerű mátrix sajátérték-egyenlet. A (9)-ben szereplő $S^{-1/2}(k)$ és $S^{+1/2}(k)$ mátrixok, a Löwdin-féle [7] sorfejtéses eljárástól eltérően, amint azt jól ismert mátrixelméleti tételek felhasználásával meg lehetett mutatni [8], egzaktul is kiszámíthatók a $S(k)$ mátrix diagonalizálása útján (amely $2n$ -ed rendű valós mátrix sajátérték-egyenletévé való átírással [9], vagy komplex aritmetika segítségével végezhető el) az

$$S^{\pm 1/2}(k) = V(k) s(k)^{\pm 1/2} V^+(k) \quad (10)$$

egyenlet alapján. Itt a $V(k)$ mátrix az $S(k)$ mátrix $v_i(k)$ sajátvektoraiból képzett mátrix és az $s(k)$ diagonális mátrix elemei $S(k)$ sajátértékei. Mivel, mint az könnyen

bebizonyítható, $S(k)$ -nak csak pozitív sajátértékei lehetnek, $s(k)^{\pm 1/2}$ könnyen képezhető.

3. Az $S(k)$ mátrix kiküszöbölésére kidolgozott módszert G. Del Re-vel egyszerű modell-polimer tight binding módszerrel első szomszéd közelítésben ($q = 0, +1$ és -1) kapott sávszerkezetének tanulmányozására alkalmaztuk [II]. Az M. Carpentieri által készített program felhasználásával kapott eredmények szerint az elemi cellában 4 AO-t tartalmazó modell-polimer egyes sávjainak helyzete erősen változott az $S(0)$ és $S(+1)$ mátrix elemeinek változtatásával [II]. A módszert ezután Békássy Csabával és Biczó Gézával [10] homopolinukleotidok sáv szerkezetének meghatározására használtuk fel ismét tight binding közelítésben $S(k)$ figyelembevételével. Az eredmények — a molekulák esetéhez hasonlóan — lényegesen eltértek az átfedés elhanyagolásával előzőleg kapott [9] eredményektől.

4. A $H(k)$ mátrix elemei lineáris lánc esetén első szomszéd kölcsönhatás közelítésben

$$[H(k)]_{f,g} = [H(0)]_{f,g} + [H(+1)]_{f,g} e^{ika} + [H(-1)]_{f,g} e^{-ika} \quad (11)$$

alakúak lesznek. Ha a $H(q)$ ($q=0, \pm 1$) mátrixok elemeinek kiszámítására az *ab initio* számításra alkalmas Rothaan-féle zárt héjú SCF LCAO MO módszert [1] alkalmazzuk (tehát ily módon *ab initio* SCF LCAO kristálpálya módszert konstruálunk), a $H(q)$ mátrix elemeire a

$$[H(q)]_{f,g} = \langle \chi_f^0 | -\frac{1}{2} \Delta - \sum'_{q_1=0, \pm 1} \sum_{\alpha=1}^{n_m} \frac{Z_\alpha}{|\vec{r}_\alpha - \vec{R}_{q_1}|} | \chi_g^q \rangle + \sum_{r,s=1}^n p_{r,s}(q) \cdot \sum'_{\substack{q_1, q_2=0 \\ +1, -1}} [\langle \chi_f^0 \chi_r^{q_1} | \chi_g^q \chi_s^{q_2} \rangle - \frac{1}{2} \langle \chi_f^0 \chi_r^{q_1} | \chi_s^{q_2} \chi_g^q \rangle] \quad (q=0, +1, -1) \quad (12)$$

kifejezés volt levezethető [1]. Itt Z_α az α -adik mag töltése, \vec{R}_{q_1} a q_1 -edik cellában levő α -adik mag helyvektora, n_m az elemi cellán belül levő magok száma és a χ_g^q rövidített jelölés a q -adik cella g -edik atomján centrált AO-t jelenti, $\chi_g^q = \chi(\vec{r} - \vec{r}_g^0 - qa)$ ahol \vec{r}_g^0 a 0-adik cellában levő g -edik mag helyvektora. (Megjegyzendő, hogy ha egy atomnak több AO-ja van, az f, g indexeknek még alindexeket kell adnunk.) A (12)-ben előforduló négycentrumos integrálok definíciója

$$\langle \chi_f^0 \chi_r^{q_1} | \chi_g^q \chi_s^{q_2} \rangle \equiv \int \chi_f^0(\vec{r}_1) \chi_r^{q_1}(\vec{r}_2) \frac{1}{r_{12}} \chi_g^q(\vec{r}_1) \chi_s^{q_2}(\vec{r}_2) dV_2; \quad (13)$$

a q_1 , illetve a q_2 szerinti szummajel melletti vessző azt jelenti, hogy az összegzésből kizárandók mindazok az integrálok, amelyekre $|q_1 - q_2| > 1$ vagy $|q_1 - q| > 1$, vagy $|q_2 - q| > 1$ (szigorú értelemben vett első szomszéd közelítés). Végül

$$p_{r,s}(q) = \frac{a}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} 2 \sum_{i=1}^{n^*} d_{i,r}^*(k) d_{i,s}(k) e^{ikqa} dk = \frac{2a}{\pi} \operatorname{Re} \left[\int_0^{\pi/a} \sum_{i=1}^{n^*} d_{i,r}^*(k) d_{i,s}(k) e^{ikqa} dk \right], \quad (14)$$

ahol n^* a betöltött sávok számát jelenti.

Könnyen meg lehet mutatni [VII], hogy ha a fent definiált szigorú értelemben vett első szomszéd közelítést alkalmazzuk, egy lineáris lánc *ab initio* számítása során felépő különböző négycentrumos integrálok száma csak négyszerese az elemi cellát alkotó négycentrumos integrálok számának. Ezért ha egy molekula *ab initio* számítása már elvégezhető, az ismétlődéséből felépíthető lánc *ab initio* számítása is elvégezhető lesz. Ezt figyelembe véve az IBM Fejlesztési Laboratóriumában (San Jose, California) J. M. André [11] és E. Clementi beprogramozta az ismertetett sávszámítási módszerünket az IBM 360/105 számítógépre, azt H₂-molekulákból álló lánc és polién *ab initio* sáv szerkezetének kiszámítására már alkalmazta és a közeljövőben periodikus DNS és fehérje modellek *ab initio* sáv szerkezetének kiszámítására kívánja alkalmazni.

Megemlíthető még, hogy az *ab initio* SCF LCAO CO módszert megfogalmaztuk 3-dimenziós kristály esetén is az összes szomszéd közelítésben [I].

5. A (12) kifejezésben ugyanazokat a közelítéseket bevezetve, mint amelyeket a π -elektronok tárgyalására szolgáló Pariser-Párr-Pople módszer [3, 4] alkalmaz molekulák esetén (differenciális átfedés elhanyagolása, a megmaradó integráloknak atomspektroszkópiai adatokból való számolása, illetve parametrizálása), a $[\mathbf{H}(k)]_{f,g}$ mátrixelemekre lineáris lánc esetén az első szomszéd közelítésben a

$$[\mathbf{H}(k)]_{f,f} = -I_f + \frac{1}{2}p_{f,f}(I_f - E_f) + \sum_{g \neq f}^n [p_{g,g}(0) - Z_g]v_{f,g}(0) + \sum_{g=1}^n [p_{g,g}(0) - Z_g] \cdot \\ \cdot [v_{f,g}(1) + v_{f,g}(-1)] + [\beta_{f,f}(1) - \frac{1}{2}p_{f,f}(1)v_{f,f}(1)]e^{ika} + \\ + [\beta_{f,f}(-1) - \frac{1}{2}p_{f,f}(-1)v_{f,f}(-1)]e^{-ika}, \quad (15a)$$

$$[\mathbf{H}(k)]_{f,g} = \beta_{f,g}(0) - \frac{1}{2}p_{f,g}(0)v_{f,g}(0) + [\beta_{f,g}(1) - \frac{1}{2}p_{f,g}(1)v_{f,g}(1)]e^{ika} + \\ + [\beta_{f,g}(-1) - \frac{1}{2}p_{f,g}(-1)v_{f,g}(-1)]e^{-ika} \quad (15b)$$

kifejezések adódtak [III, 12]. Itt a még nem definiált mennyiségek közül I_f , illetve az E_f az f -edik atom ionizációs potenciálja, illetve elektronaffinitása a megfelelő vegyértékállapotban, Z_f az f -edik atom által szolgáltatott π -elektronok száma. Továbbá a

$$\beta_{f,g}(q) = \langle \chi_f^0 | H^{\text{törzs}} | \chi_g^q \rangle \quad (16)$$

egy-elektronos integrálokat a módszer $q=0$ esetén a P-P-P módszerhez hasonlóan empirikus paramétereknek tekinti, míg $q \neq 0$ esetén a megfelelő $S_{f,g}(q)$ átfedési integrálokkal arányosnak veszi fel. A

$$v_{f,g}(q) = \langle \chi_f^0 \chi_g^q | \chi_f^0 \chi_g^q \rangle \quad (17)$$

Coulomb-integrálokat — a P-P-P módszerhez hasonlóan — nem elméleti úton számítottuk, hanem azokra az elméletileg adódóknál kisebb szemempirikus értékeket vettünk fel. Így a periodikus DNS modellekre való alkalmazás esetén ezekre a Mataga és Nishimoto-tól [13] származó

$$v_{f,g}(q) = \frac{e^2}{a_{f,g} + R_{f,g}(q)}; \quad \frac{e^2}{a_{f,g}} = \frac{1}{2} [I_f + I_g - E_f - E_g] \quad (18)$$

kifejezést használtuk, ahol

$$R_{f,g}(q) = |\vec{R}_f^0 - \vec{R}_g^q|.$$

6. Az előző pontban vázolt szemiempirikus SCF LCAO (P-P-P) CO módszer nemzetközi kooperációban különböző periodikus DNS modellek π -elektron energiasávjainak meghatározására használtuk fel. A D. K. Rai és K. Appel által készített program felhasználásával az Uppsalai Egyetem CDC 3600 számítógépén először az 5 homopolinukleotid (poli A, poli T, poli G, poli C, és poli U) π -elektron sávjait határoztuk meg [III]. Miután ugyanezt a módszert J. Avery és J. Packer az Imperial College (London) IBM 7094-es számítógépére beprogramozta, a sáv-számítást a poli (A—T) és a poli (G—C) kétláncú periodikus DNS modellekre végeztük el [IV]. Ezután a Californiai Egyetem (Lawrence Radiation Laboratory) CDC 6600-as számítógépén került sor a bonyolultabb

$$\text{poli} \begin{pmatrix} \text{A—T} \\ \text{G—C} \end{pmatrix}, \text{ poli} \begin{pmatrix} \text{A—T} \\ \text{C—G} \end{pmatrix}, \text{ poli} \begin{pmatrix} \text{A—T} \\ \text{T—A} \end{pmatrix} \text{ és } \text{poli} \begin{pmatrix} \text{G—C} \\ \text{C—G} \end{pmatrix}$$

periodikus DNS modellek π -elektron sávjainak számítására a P-P-P közelítésben a B. F. Rozsnyai által készített program felhasználásával [V]. Az utóbbi számítógépen egy bonyolult periodikus DNS modell sáv szerkezetének meghatározása, amely kb. 30 80-adrendű mátrix diagonalizálását és nagyszámú numerikus integrálást [a $p_{r,s}(q)$ mátrixelemek kiszámítását minden iterációs lépésben] igényelt, kb. fél órát vett igénybe.

A kapott eredmények szerint [III, IV, V] a számolt periodikus DNS modellek a sáv szerkezet szempontjából két csoportba oszthatók. A homopolinukleotidok és a poli (A—T), poli (G—C) rendszerek meglehetősen széles sávúak (a legalsó betöltött sáv szélessége ~ 1 eV, a vegyértéksáv $0,2\text{--}0,3$ eV és a vezetési sáv $\sim 0,2$ eV). Ezzel szemben a bonyolult periodikus DNS modellek

$$(\text{poli} \begin{pmatrix} \text{A—T} \\ \text{G—C} \end{pmatrix},$$

stb.) sávjai igen keskenyek (a legalsó betöltött sáv, a vegyértéksáv és a vezetési sáv szélességei rendre $\sim 0,1$, $0,03$, $0,01$ és $\sim 0,01$ eV). A kapott sáv szerkezetek alapján Suhai Sándor által elvégzett közepes szabad úthossz becslések [14] a széles-sávú modelleknél $\Delta = 20\text{--}30$ a-t, míg a keskenysávú modelleknél $\Delta = 1\text{--}5$ a-t eredményeztek (az elemi transláció a DNS-ben $a = 3,36$ Å). Mindebből következik, hogy a szélessávú modellek esetén, amikor ugyanaz a bázis, illetve bázispár ismétlődik a DNS-ben, a π -elektronok delokalizált, Bloch-típusú leírása helytálló. Ezzel szemben a keskenysávú bonyolult periodikus DNS modellek esetében már kérdésessé válik, hogy a Bloch-típusú leírás, vagy a hopping mechanizmus feltételezése a helyesebb [VII]. A valóságos aperiodikus DNS sáv szerkezet valószínűleg a két szélső esetet képviselő széles és keskenysávú modellek sáv szerkezete között van.

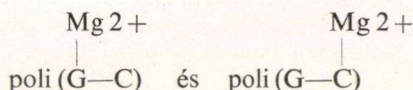
Könnyen bizonyítható, hogy a zárthéjű SCF LCAO kristálypálya módszer alkalmazása esetén a szingulett gerjesztési energiára túl nagy érték adódik [IV, 15], függetlenül attól, hogy a számítást *ab initio*, vagy szemiempirikus módszerrel végezzük el. Így a periodikus DNS modellek esetén a gerjesztési energiára ~ 2 eV-tal nagyobb érték adódott a kísérleti értéknél [IV]. SCF LCAO kristálypálya módszerek-nél ugyanis a szingulett gerjesztési energia

$${}^1\Delta E_{i \rightarrow j} = \varepsilon_j(k) - \varepsilon_i(k) - J_{i,j}(k) + 2K_{i,j}(k) \quad (19)$$

kifejezésében szereplő $J_{i,j}(k)$ Coulomb és $K_{i,j}(k)$ kicserélődési integrálok $\ln N/N$ -ként

eltűnnek, ha $N \rightarrow \infty$. Így a gerjesztési energiára jó közelítéssel a megfelelő tiltott sáv szélessége adódik, ami a Hartree-Fock-módszernél mindig jóval nagyobb, mint a szingulett gerjesztési energia (például a poli (G—C) esetén a vegyértéksáv és a vezetési sáv közötti tiltott sáv szélessége 6,0 eV, míg a megfelelő gerjesztési energia 4,0 eV [IV]).

7. A DNS-beli fémion szennyezéseknek a sávszerkezetre gyakorolt hatásának figyelembevételére első lépésként *B. F. Rozsnyaival* a



periodikus DNS modellek π -elektron energiasávjait határoztuk meg ismét a P-P-P kristálpálya módszerrel [VI]. Az első modellnél azt tételeztük fel, hogy a guanin O_{11} atomjának nem-kötő elektronpárja kapcsolódik a Mg^{2+} -kationhoz, amely így a bázispár síkjában helyezkedik el és 2 π -elektronnal hozzájárul a bázispár delokalizált π -elektronrendszeréhez. A másik esetben feltételeztünk modellünk szerint a Mg^{2+} -kationhoz a citozin NH_2 -csoportjának π -elektronpárja kapcsolódik. Az aminocsoport így közel tetraéderes szerkezetű lesz, 2 π -elektronja nem vesz többet részt a G—C bázispár delokalizált π -elektronrendszerében és a Mg^{2+} kikerül a bázispár síkjából.

A számítás során a két nettó pozitív töltésű Mg^{2+} -kation erős elektrosztatikus hatását a többi kötésre a $\beta_{f,g}(q)$ paraméterek megfelelő módosítása útján vettük figyelembe [VI]. A kapott eredmények szerint az első modellnél a Mg^{2+} -elektronjai egy igen keskeny új sávot hoztak létre, amely mélyen a következő legalsó betöltött sáv alatt helyezkedett el (a másik modell esetén természetesen nem adódott extra sáv, hanem a poli (G—C) egy sávja tűnt el). A Mg^{2+} -kation erős elektrosztatikus hatása miatt az összes többi sávok erősen perturbálódtak mindkét esetben. A sávok általában 2—3-szorosra szélesedtek ki és a második modell esetén a tiltott sáv szélessége a poli (G—C)-beli ~ 6 eV-ről ~ 2 eV-re csökkent le [VI]. Ez a tény lehetővé teszi a nagyfrekvenciás váltóárammal végzett DNS-beli vezetőképesség mérésekor kapott $\sim 0,2$ eV vezetőképességi aktiválási energia érték [16] és a tiltott sáv szélesség értékének összehasonlítását, ha figyelembe vesszük, hogy az SCF LCAO kristálpálya módszer poli (G—C) esetén a kísérletinél ~ 2 eV-tal nagyobb szingulett gerjesztési energiát eredményezett (lásd az előző pontot).

Természetesen a DNS-beli fémszennyezések hatásának reális felmérése az eddieknél sokkal kiterjedtebb további vizsgálatokat igényel, amelyeknek egy része folyamatban van.

8. Az *ab initio* SCF LCAO CO módszer $[\mathbf{H}(q)]_{f,g}$ mátrixelemeiben (lásd a (12) egyenletet) ugyanazokat az elhanyagolásokat bevezetve, mint a CNDO/2 módszer tesz molekulák esetén [5, 6], Biczó Gézával együtt a σ - és π -elektronok energiasávjainak együttes meghatározására szolgáló szemiempirikus módszert konstruáltunk [IX] mind egy-, mind két-, illetve háromdimenziós periodikus rendszerekre. Ennek az ún. CNDO kristálpálya módszernek a programozása egydimenziós esetben, *D. Beveridge*-vel együttműködve, a New York University CDC 6600-as számítógépére, kétdimenziós esetben pedig *E. Alving* közreműködésével a National Institute of Health Univac számítógépére folyamatban van. Az egydimenziós esetre vonat-

kozó programot ismét periodikus DNS modellek-, míg a kétdimenziós polimerre vonatkozó programot periodikus fehérje modellek σ - és π -energiasávjainak meghatározására szándékozunk felhasználni.*

9. Az *ab initio* SCF LCAO MO módszer formailag könnyen általánosítható periodikus polimerekre a korrelációs energia részbeni figyelembevételére szolgáló „különböző pályák különböző spinekre” módszer esetében is. Ekkor (6) helyett két egyenletünk lesz:

$${}^{\eta}\mathbf{H}(k)\mathbf{d}_i(k) = {}^{\eta}\varepsilon_i(k)\mathbf{S}(k){}^{\eta}\mathbf{d}_i(k) \quad (\eta = \alpha, \beta) \quad (20)$$

és a lineáris lánc első szomszéd kölcsönhatása esetén (11)-hez hasonlóan írhatjuk

$$[{}^{\eta}\mathbf{H}(k)]_{f,g} = [{}^{\eta}\mathbf{H}(0)]_{f,g} + [{}^{\eta}\mathbf{H}(1)]_{f,g}e^{ika} + [{}^{\eta}\mathbf{H}(-1)]_{f,g}e^{-ika} \quad (\eta = \alpha, \beta). \quad (21)$$

Az ${}^{\eta}\mathbf{H}(q)$ mátrixokat most

$$\begin{aligned} [{}^{\eta}\mathbf{H}(q)]_{f,g} = & \langle \chi_f^0 | -\frac{1}{2} \Delta - \sum_{\substack{q_1=0, \\ +1, -1}}' \sum_{\alpha} \frac{Z_{\alpha}}{|\vec{r} - \vec{R}_{\alpha}^{q_1}|} | \chi_g^q \rangle + \\ & + \sum_{r,s}^n \{ [p_{r,s}^{\alpha\alpha}(q) + p_{r,s}^{\beta\beta}(q)] \sum_{\substack{q_1, q_2=0, \\ +1, -1}}' \langle \chi_f^0 \chi_r^{q_1} | \chi_g^q \chi_s^{q_2} \rangle - \\ & - \sum_{\substack{q_1, q_2=0, \\ +1, -1}}' p_{r,s}^{\eta\eta}(q) \langle \chi_f^0 \chi_r^{q_1} | \chi_s^{q_2} \chi_g^q \rangle \} \quad (\eta = \alpha, \beta; \quad q = 0, +1, -1) \end{aligned} \quad (22)$$

egyenletek adják meg, ahol a $p_{r,s}^{\eta\eta}(q)$ mátrixelemek (14)-hez hasonlóan minden iterációs lépésben a

$$p_{r,s}^{\eta\eta}(q) = \frac{a}{2\pi} \operatorname{Re} \left[\int_0^{\pi/a} \sum_{i=1}^{n^*} {}^{\eta}d_{i,r}^*(k) {}^{\eta}d_{i,s}(k) e^{ikqa} dk \right] \quad (\eta = \alpha, \beta) \quad (23)$$

kifejezés segítségével számíthatók ki. Megjegyzendő, hogy a Biczó Gézával együtt elvégzett részletes levezetés háromdimenziós esetre és összes szomszéd kölcsönhatásra is megadta a megfelelő kifejezéseket [VIII].

10. Ismét ugyanazokat az elhanyagolásokat téve a (22) mátrixelemekben, mint a P-P-P-módszer tesz molekulák esetén, megkaptuk a π -elektronok sávjainak vizsgálatára szolgáló különböző pályák különböző spinekre szemiempirikus SCF LCAO (P-P-P) kristáлыпálya módszer kifejezéseit [VIII].**

11. Amint az jól ismert, ha az α - és β -spinű elektronokra külön egy-elektron-függvényeket határozunk meg és ezekből építünk fel Slater determináns alakjában egy sokelektron-hullámfüggvényt, az utóbbi nem lesz sajátfüggvénye S^2 -nek. Ezért F. Martinoval együtt a különböző pályák különböző spinekre módszer korrektebbé váló tétele céljából spinprocionált Slater-determinánssal állítottuk elő a Hamilton-operátor várható értékét és ezt variáltuk. A számításnál felhasználtuk a

* Az értekezés benyújtása óta ilyen számításokra már sor került mind az MTA CDC 3300-as számítógépén [17], mind az NYU CDC 6600-as számítógépén [18].

** Az értekezés benyújtása óta ez a módszer is alkalmazásra került egy periodikus DNS modell esetén [19].

párosítási tételt, amely szerint létezik egy olyan unitér transzformáció, amely az α - és β -spinű elektronok pályáit kölcsönösen ortogonálisítja a két függvénytörzsből kivett egy-egy függvényből álló párok kivételével:

$$\langle \varphi_i^\alpha | \varphi_j^\beta \rangle = \lambda_i \delta_{ij} \quad (24)$$

[20]. Bevezetve a $\lambda_1 = \lambda_2 = \dots = \lambda_n = \lambda$ elhanyagolást ($2n$ az elektronok száma) a variációs számítás *F. Martinov*al együtt történt elvégzése és LCAO MO-k bevezetése után a meglehetősen bonyolult

$${}^\alpha \mathbf{H} \mathbf{C}_i^\alpha + \mathbf{h} \mathbf{C}_i^\beta = \mathbf{S} \sum_j (e_j^{\alpha\alpha} \mathbf{C}_j^\alpha + e_j^{\alpha\beta} \mathbf{C}_j^\beta), \quad (25a)$$

$${}^\beta \mathbf{H} \mathbf{C}_i^\beta + \mathbf{h} \mathbf{C}_i^\alpha = \mathbf{S} \sum_j (e_j^{\beta\beta} \mathbf{C}_j^\beta + e_j^{\beta\alpha} \mathbf{C}_j^\alpha) \quad (25b)$$

ún. extended Hartree-Fock mátrixegyenletekre lehetett jutni (X). Az ${}^\alpha \mathbf{H}$ ($\eta = \alpha, \beta$) és \mathbf{h} mátrixok definícióját molekulákra az *ab initio* esetben [X] (19a)–(19c), (20a)–(20b), (11) és (15a)–(15b) egyenletei, míg a P-P-P esetben (mikor $\mathbf{S} = \mathbf{1}$) [X] (23a)–(23e) egyenletei adják meg (extended Hartree-Fock P-P-P módszer). Megemlítendő még, hogy (25a)-ba és (25b)-be ismét $\mathbf{S} = \mathbf{1}$ -t helyettesítve és az ${}^\alpha \mathbf{H}$ és \mathbf{h} mátrixok elemeiben a CNDO/2 [5] módszer elhanyagolásait bevezetve megfogalmazható volt az extended Hartree-Fock CNDO módszer is molekulákra [XII]. Az utóbbi esetben a \mathbf{H} és \mathbf{h} mátrixok definícióját [XII] (38a)–(40c) egyenletei adják meg.

A (25a) és (25b) egyenletek megoldására különböző numerikus eljárásokat dolgoztunk ki [21, 22] amelyek programozása a P-P-P esetben folyamatban van.

A bevezetett különböző extended Hartree-Fock-módszerekkel kapcsolatban még megjegyzendő, hogy meg lehet mutatni, hogy a (25a) és (25b) egyenletek, illetve a megfelelő operátor-egyenletek, amelyekből az előbbiek levezethetők voltak [X] $\lambda = 1$ (zárt héj) esetén visszaadják a konvencionális Hartree-Fock-egyenleteket. Az új extended Hartree-Fock-egyenletek másik érdekes tulajdonsága, hogy ha $n \rightarrow \infty$ és $s \ll n$, azok átmennek a spinproiccionálás nélküli különböző pályák különböző spinekre Hartree-Fock egyenletekbe („unrestricted” Hartree-Fock egyenletek, illetve a szilárdtest-fizikában szokásos elnevezéssel spinpolarizált Hartree-Fock egyenletek [23]).

12. Noha az utolsó bekezdésben elmondottak szerint, ha $n \rightarrow \infty$, a spinproiccionálás szükségtelenné válik, két okból mégis érdekesnek látszott a (25a) és (25b) egyenleteket periodikus polimerekre átlánosítani. Egyrészt ily módon könnyebben lehetővé válik véges periodikus rendszerek (például oligonukleotidok, vagy oligopeptidek) vizsgálata a korrelációs energia részleges figyelembevételével. Másrészt nagy spinű (ferromágneses) rendszerek számításánál (amikor tehát nem teljesül az $s \ll n$ feltétel) nagy n esetén is szükség van a spinproiccionálásra, ha a különböző pályák különböző spinekre módszert kívánjuk alkalmazni.

A (25a) és (25b) egyenletekre alkalmazva az **1.** pontban vázolt blokkdiagonalizációs technikát lineáris lánc esetén az

$${}^\alpha \mathbf{H}(k) \mathbf{d}_i^\alpha(k) + {}^\beta \mathbf{h}(k) \mathbf{d}_i^\beta(k) = \mathbf{S}(k) \sum_j [e_j^{\alpha\alpha}(k) \mathbf{d}_j^\alpha(k) + e_j^{\alpha\beta}(k) \mathbf{d}_j^\beta(k)] \quad (26a)$$

$${}^\beta \mathbf{H}(k) \mathbf{d}_i^\beta(k) + {}^\alpha \mathbf{h}(k) \mathbf{d}_i^\alpha(k) = \mathbf{S}(k) \sum_j [e_j^{\beta\beta}(k) \mathbf{d}_j^\beta(k) + e_j^{\beta\alpha}(k) \mathbf{d}_j^\alpha(k)] \quad (26b)$$

mátrixegyenletekre jutunk, ahol ismét

$${}^{\eta}\mathbf{H}(k) = \sum_{q=-N}^{+N} e^{ikqa} {}^{\eta}\mathbf{H}(q) \quad (\eta = \alpha, \beta), \quad (27a)$$

$${}^{\eta}\mathbf{h}(k) = \sum_{q=-N}^{+N} e^{ikqa} {}^{\eta}\mathbf{h}(q) \quad (\eta = \alpha, \beta), \quad (27b)$$

és

$$\mathbf{S}(k) = \sum_{q=-N}^{+N} e^{ikqa} \mathbf{S}(q).$$

(A levezetést természetesen háromdimenziós esetben is el lehetett végezni [XII].)

Első szomszéd kölcsönhatás alkalmazásakor lineáris láncra az *ab initio* esetben az ${}^{\eta}\mathbf{H}(q)$ és ${}^{\eta}\mathbf{h}(q)$ mátrixok elemeit [XII] (28a)—(28d) és (34a)—(34c) egyenletei adják meg (*ab initio* extended Hartree-Fock kristáлыпálya módszer). A P-P-P, illetve a CNDO módszernél szokásos elhanyagolásokat bevezetve az ${}^{\eta}\mathbf{H}(q)$ és ${}^{\eta}\mathbf{h}(q)$ mátrixok elemeiben és természetesen $\mathbf{S}=\mathbf{I}$ -t helyettesítve, megkonstruálhatók voltak a P-P-P extended Hartree-Fock [XI], illetve CNDO extended Hartree-Fock CO módszerek [XII] is. (Az ${}^{\eta}\mathbf{H}(q)$ és ${}^{\eta}\mathbf{h}(q)$ mátrixok elemeit lineáris láncra — első szomszéd közelítést alkalmazva — a P-P-P esetben [XI] (3a)—(3g) egyenletei, míg a CNDO esetben [XII] (48a)—(55) egyenletei adják meg.)

A röviden ismertetett extended Hartree-Fock CO módszerek alkalmazására még nem került sor, de remélhető, hogy szemiempirikus változatainak hazai számítógépekre és *ab initio* alakjuknak külföldi nagy sebességű számítógépekre való programozása a közeljövőben megindul.

IRODALOM

- I. G. Del Re., J. Ladik and G. Biczó, Self-Consistent Field Treatment of Polymers, I. Infinite Three-Dimensional Case. *Phys. Rev.* 155, 997—1003, 1967.
- II. G. Del Re, J. Ladik and M. Carpentieri, On the Effect of the Inclusion of Overlap in Tight-Binding Band Calculations of Solids. *Acta Phys. Hung.*, 24, 391—402, 1968.
- III. J. Ladik, D. K. Rai and K. Appel, Semiempirical SCF LCAO Crystal Orbital Calculation of the Energy Band Structure of the Homopolynucleotides, *J. Mol. Spectr.*, 27, 72—78, 1968.
- IV. J. Avery, J. Packer, J. Ladik and G. Biczó, Energy Band Structure Calculations for Poly (A—T) and Poly (G—C) in the Semiempirical SCF LCAO Crystal Orbital Approximation. *J. Mol. Spectr.*, 29, 194—203, 1969.
- V. B. F. Rozsnyai, F. Martino and J. Ladik, Investigation of the Electronic Structure of Complicated Periodic DNA Models with the Aid of the Semiempirical SCF LCAO Crystal Orbital Method. *J. Chem. Phys.* 52, 5708—5711, 1970.
- VI. B. F. Rozsnyai and J. Ladik, Investigation of the Effects of Hydration and Divalent Metal Ions on Nucleotide Base Pairs. I. Single G—C and Poly (G—C). *J. Chem. Phys.* 52, 5711—5717, 1970.
- VII. J. Ladik: Energy Bands in DNA. *Int. J. Quant. Chem.* S4, 307, 1971.
- VIII. J. Ladik and G. Biczó, Some Developments in the Semiempirical Theories of Molecular Crystals, III. Different Bands for Different Spins for Electrons in the P-P-P Approximation. *Acta. Chim. Hung.* 67, 297, 1971.
- IX. J. Ladik and G. Biczó, Some Developments in the Semiempirical Theories of Molecular Crystals, IV. σ — π (CNDO) Bands. *Acta Chim. Hung.* 67, 397, 1971.
- X. F. Martino and J. Ladik, Semiempirical Extended Hartree-Fock LCAO MO Method for Molecules, *J. Chem. Phys.*, 52, 2262—2266, 1970.

- XI. *J. Ladik and F. Martino*, Semiempirical Extended Hartree-Fock LCAO Crystal Orbital Method. *J. Chem. Phys.*, **52**, 2259—2261, 1970.
- XII. *J. Ladik and F. Martino*, Extended Hartree-Fock Crystal Orbital Schemes in Different Approximations, *Acta Phys. Hung.* (beküldve).
1. *F. Beleznay and G. Biczó*, *J. Chem. Phys.*, **41**, 2351, 1964; *K. H. Johnson*, *Int. J. Quant. Chem.*, **2**, 5233, 1968.
 2. *C. C. J. Roothaan*, *Revs. Mod. Phys.*, **32**, 179, 1960.
 3. *R. Pariser and R. G. Parr*, *J. Chem. Phys.*, **21**, 466, 767, 1953.
 4. *J. A. Pople*, *Trans. Faraday Soc.*, **49**, 1375, 1953.
 5. *J. A. Pople, P. P. Santry and C. A. Segal*, *J. Chem. Phys.*, **43**, 129, 136, 1965.
 6. *J. A. Pople, D. L. Beveridge and P. A. Dobosh*: *J. Chem. Phys.*, **47**, 2026, 1967.
 7. *P.-O. Löwdin*, *J. Chem. Phys.*, **365**, 1953.
 8. *Ladik János*: *Kvantumkémia*. Műszaki Kiadó Budapest, 1969. 136. o.
 9. *L. pld. J. Ladik and K. Appel*, *J. Chem. Phys.*, **40**, 2470, 1964.
 10. *Cs. Békássy, J. Ladik and G. Biczó*, *Acta Phys. Hung.* (elfogadva).
 11. *J. M. André*, *J. Chem. Phys.*, **50**, 1536, 1969.
 12. *J. Ladik*, *Acta Phys. Hung.*, **18**, 185, 1965.
 13. *N. Mataga and K. Nishimoto*: *Z. Physik. Chemie*. **13**, 140, 1957.
 14. *S. Suhai*, *J. Chem. Phys.*, (elfogadva).
 15. *A. Bierman and J. Ladik*: nem publikált eredmény.
 16. *C. T. O'Konski, P. Moser and M. Shirai*, *Biopolymers Symp.*, **1**, 479, 1964.
 17. *S. Suhai and J. Ladik*, *Int. J. Quant. Chem.* (közlésre beküldve); *S. Suhai és J. Ladik*, *J. Phys. Chem. Solids* (közlésre beküldve).
 18. *D. Beveridge, I. Jano and J. Ladik*, *J. Chem. Phys.* (közlésre beküldve).
 19. *M. Kertész and J. Ladik*, *Acta Chim. Hung.* (közlésre való előkészítés alatt).
 20. *P.-O. Löwdin*, *J. Appl. Phys. Suppl.*, **33**, 251, 1962.
 21. *H. Sklenar, J. Ladik and S. Suhai*: (nem közölt eredmény).
 22. *G. Del Re, J. Ladik, G. Biczó and S. Suhai* (nem közölt eredmény).

KÍSÉRLETI VIZSGÁLATOK 14 MeV ENERGIAJÚ NEUTRONOKKAL*

ÁDÁM ANDRÁS

MTA Központi Fizikai Kutató Intézet, Budapest

TARTALOMJEGYZÉK

I. Bevezetés és összefoglalás	336
A) KÍSÉRLETI MÓDSZEREK ÉS TECHNIKA	
II. A visszalökött protonok módszere	339
III. Repülési—idő—spektrométer	341
1. §. A repülési idő-módszer	341
2. §. A pulzált módszer	343
3. §. Az alfa-módszer	344
4. §. A pulzálás és az alfa-módszer kombinálása	345
5. §. A háttér	346
6. §. A szcintillációs detektor szerepe az időfelbontásban	349
7. §. Az impulzusok formálása	352
8. §. A koincidenencia-kör vizsgálata	353
9. §. Az időszórás csökkentése kompenzációval	357
10. §. Detektorok közötti „átszórás” kiküszöbölése	363
11. §. Sokdetektoros mérőrendszer	368
12. §. Előzetes adatfeldolgozás (n , n') mérésnél	373
B) MAGFIZIKAI KÍSÉRLETEK	
IV. Az (n , $2n$) magreakció	380
1. §. Bevezetés	380
2. §. A héjefektusok problémája	384
3. §. Direkt effektusok lehetősége az (n , $2n$) reakcióban	387
V. Direkt folyamatok részesedésének kísérleti vizsgálata az (n , $2n$) reakcióban	390
1. §. A mérési módszer és a regisztráló berendezés	390
2. §. Kiértékelési eljárás	394
3. §. Véletlen koincidenenciák	397
4. §. Az elvégzett mérések	399
VI. Gyors neutronok kisszögű rugalmas szórásának „anomáliája”	400
1. §. Bevezetés	400
2. §. $^{238}\text{U}(n, \alpha n')^{234}\text{Th}$ reakció lehetőségének kísérleti vizsgálata	402
3. §. Az „anomália” értelmezése	406
VII. Kollektív nívók vizsgálata 14 MeV energiájú neutronokkal	411
1. §. Bevezetés	411
2. §. A kollektív állapotok vizsgálatának elmélete	413
3. §. A rugalmas szórás mérése ^{32}S és ^{56}Fe magokon	419
VIII. Köszönetnyilvánítás	427
IX. Irodalomjegyzék	428

* Doktori disszertáció. Megvédve 1972. január.

I. Bevezetés és összefoglalás

A gyors neutronokkal keltett magreakciók vizsgálata a magfizika legnehezebb feladatai közé tartozik. Míg a töltött részecskéket közvetlenül, a neutronokat csak közvetve, reakciótermékeik, vagy a visszalökött magok ionizációja útján lehet detektálni. A közvetett regisztrálás következményeként a gyors neutronokkal végzett kísérletekben igen hosszú adatgyűjtési idő szükséges, sokszorosan hosszabb, mint töltött részecskék esetében. További súlyos problémát jelent a háttér. A gyors neutronok szabad úthossza anyagban nagyságrendekkel nagyobb, mint a töltött részecskéké. A háttér a target környezetében levő anyagokon, a padlón és a falakon szórt neutronok, valamint a nagy mennyiségben keletkező kísérő gamma-sugárzás képezi. Utóbbira a neutrontektorok nagy, a neutronokkal összemérhető hatásfokkal megszólalnak.

A nagyszámú kísérleti nehézség ellenére a neutronokkal keltett magreakciók vizsgálata a magreakciók tanulmányozásának egyik fontos területe. Az első ilyen kísérletet *Rosen* végezte 1953-ban, fotoemulzió segítségével. Azóta a gyorsneutron-spektroszkópia sokat fejlődött, új módszereket dolgoztak ki és a neutronokkal végzett magfizikai kutatások szerepe állandóan növekszik. Különösen megnőtt az ilyen vizsgálatok száma azután, hogy létrejött a trícium targetek „ipari” előállítására és kereskedelmi forgalma. A ${}^3\text{H}(d, n){}^4\text{He}$ magreakció útján nagy hozamú és viszonylag olcsó neutrongenerátort lehet építeni 14 MeV-os neutronok előállítására, ezért ezen az energianál különösen sok kísérletet végeztek.

Jelen disszertáció a szerző és kutatócsoportja által az elmúlt mintegy tíz év során 14 MeV energiájú neutronokkal végzett kutatómunkáját írja le. A gyors neutronokkal végzett magfizikai kutatásokban a kísérleti-technikai és metodikai problémáknak általában nagy teret kell szentelni. A kísérleti munkát többnyire nem lehet metodikai problémák vizsgálatától szétválasztani. Esetünkben létre kellett hoznunk a kísérleti berendezéseket. Így sok technikai és metodikai feladattal foglalkoztunk és az eredmények egy részét ezen a területen értük el. Ennek megfelelően a disszertáció két részre tagolódik. Az első részben (A) metodikai és kísérleti-technikai eredményeinkről számolok be és ismertetem a magfizikai kísérleteinkben alkalmazott berendezéseket és eljárásokat. A második részben (B) magfizikai vizsgálatainkat tárgyalom.

A szokásostól némiképp eltérve az irodalom ismertetése nem alkot egy külön részt a disszertációban. Az irodalmi hivatkozások párhuzamosan fordulnak elő a saját publikációinkra való hivatkozásokkal. A felhasznált saját publikációkat az „Irodalomjegyzék” elején soroltam fel.

A disszertációban minden fejezetben olyan problémakörrel foglalkozom, amelyben kutatómunkát végeztünk és saját eredményeinkről is beszámolhatok. Kivételt csak az I. fejezet: A visszalökött protonok módszere képez, amelyben az olvasó kényelme érdekében tankönyvekben is megtalálható összefüggéseket foglaltam össze.

A tárgyalt vizsgálatok egy része nem lezárt, további munka nálunk is és másutt is folyamatban van. Célszerűnek láttam a folyamatban levő munkáinkat is ismertetni. Így pl. leírtam a sokdetektoros mérőrendszert, amely nem tekinthető még befejezettnek. Ezzel a berendezéssel az első magfizikai mérések előkészítése most van folyamatban. Hasonlóan az $(n, 2n)$ mechanizmusának vizsgálata terén is még csak az első lépések történtek meg, az elért eredmények a reakciómechanizmusra vonatkozólag

előzetesnek tekinthetők; lényegesebb eredmény a részletesebb kutatás metodikai feltételeinek kidolgozása.

Az alábbiakban összefoglalom a célkitűzéseinket, valamint az elért főbb eredményeket, amelyeket a disszertáció első részében dolgoztam fel:

- a) A munkát a gyorsítóberendezés megépítésével kellett elkezdenünk. Bár az alacsony feszültségű ~ 200 kV-os kaszkád-generátorral a $^3\text{H}(d, n)^4\text{He}$ egzotermikus magreakció alapján működő úgynevezett 14 MeV energiájú neutrongenerátorok működési elvei az 1950-es évek végére, amikor mi a munkát elkezdjük, ismertek voltak, a neutrongenerátor építése során a fókuszálás, a tríciumtarget kezelése, a neutronhozam-mérés, és a target élettartama vonatkozásában szerzett tapasztalataink új felismeréseket képeztek [A60]*.
- b) Kezdetben a neutron-spektrométer elektronikai problémái is teljesen a mi feladatunkat képezték. A kialakított rendszer fejlesztésével a nanoszekundumos méréstechnikánk javításával a későbbiekben Szabó László, Kozma Gyula és Lohonyai László foglalkoztak együttműködve a szerzővel. A III. 6 §–8 §-a tartalmazza a kifejlesztett nanoszekundumos méréstechnika elveit, az impulzusformálás és az időfelbontás vonatkozásában elért eredményeket [A62].
- c) 1964-ben felismertük a $^3\text{H}(d, n)^4\text{He}$ neutrontermelő magreakció visszalökött alfa részecskéi felhasználásának jelentőségét az időmérés céljára [A64]. A visszalökött alfa részecskék detektálásának megvalósítása (III. 3 §) sok esetben nagyon előnyösnek bizonyult az időfelbontás és a jel/háttér, illetve a szükséges regisztrációs idő szempontjából.
- d) Felismertük a visszalökött-alfa módszer és a pulzálás kombinálásának előnyeit [A64a]. Az alfa módszerrel az alkalmazható neutronintenzitást a véletlen koincidenciák korlátozzák. A pulzált módszerrel az intenzitás olyan nagy lehet, amennyit a berendezés teljesítőképessége, vagy a detektor terhelhetősége megenged. A két módszer kombinálása sok esetben egyesíti a két módszer előnyeit (III. 4 §).
- e) A közelmúltban sikerült Pála Gabriellával közösen a pulzálást és az alfa-módszert, valamint a kettő kombinációját kielégítően és általánosan összehasonlítni [A71], (III. 5 §).
- f) A gyorsneutron-repülési-idő spektrométerekben a regisztrálás a meglökött protonok detektálása útján történik. Monoenergiás neutronnyaláb hatására az impulzusok amplitúdóspektruma széles, úgynevezett téglalap spektrum. Az időszórás döntő tényezője abból származik, hogy a különböző amplitúdójú impulzusok különböző időpontban érik el a rendszer indulási szintjét. Kidolgoztunk egy egyszerű módszert, amit kompenzálásnak neveztünk, amelynek segítségével ezen effektus hatása kevésbé érvényesül és az időfelbontás nagymértékben megjavul [A64b] (III. 9 §).
- g) Kidolgoztuk a kompenzálás elveit a sok neutrontektoros mérőrendszerre, a kompenzáló áramkörök elhagyásával számológépi program alapján [A68].
- h) Két neutronra vezető magreakciók vizsgálatát megnehezíti, sőt bizonyos esetekben lehetetlenné teszi az, hogy mindkét detektor megszólalhat ugyanarra a neutronra. Felismertünk egy elvet és kidolgoztunk egy módszert ezen „átszórási” jelenség kiküszöbölésére [A65], (III. 10 §).

* A generátor építésével kapcsolatosan szerzett tapasztalatokat később sem fogom részletezni.

- i) A gyorsneutronokkal végzett kutatómunka alapvető problémája a hosszú regisztrálási idő. Az elvégezhető kísérletek körét a szükséges regisztrálási idő korlátozza. Évek óta foglalkozunk egy sokdetektoros mérőrendszer kifejlesztésével, aminek megépítése a közelmúltban megvalósult. Az alkalmazott elvek és eljárások kipróbálására számos előkísérletet végeztünk. A szükséges „TPA” számológépi programok kidolgozása és kipróbálása, valamint a rendszer kutatómunkára való alkalmazása folyamatban van (III. 11 §).

A berendezés továbbfejlesztése és a metodikai kutatómunka évek óta párhuzamosan folyik a magfizikai kísérleti vizsgálatokkal. A disszertáció második része (B) magfizikai kísérleteinket tárgyalja. A felvetett problémák túlnyomó többsége a 14 MeV energiájú neutronok rugalmas és rugalmatlan kölcsönhatásaival foglalkozott, vagyis az (n, n) , (n, n') és $(n, 2n)$ magreakciókkal.*

Különös fontosságot tulajdonítottunk az $(n, 2n)$ reakció problémájának. Ez a folyamat 14 MeV energiájú neutronokkal való bombázásnál nagyon jelentős szerepet játszik, gyakran ez az egyedüli számottevő rugalmatlan folyamat. Mégis kísérleti nehézségek miatt ezen magreakcióról nagyon keveset tudunk, főleg aktivációs módszerrel mért hatáskeresztmetszet-adatokat. A reakció mechanizmusára vonatkozóan azt lehet tudni, hogy a kompaund mag kialakulásának nagy a valószínűsége, de emellett jogos az a várakozás, hogy más direkt folyamatok is szerepet játszanak.

A magfizikai kísérleti munkát és az elért eredményeket az alábbiakban foglalom össze:

- a) Kísérletet végeztünk Bi és Pb magokon az $(n, 2n)$ magreakció mechanizmusának tanulmányozására [A63]. Nekünk sikerült első ízben közvetlen mérést végezni a kilépő neutronok közötti koincidenciák regisztrálása útján. Olyan kiértékelési eljárást alkalmaztunk, amelynek segítségével sikerült a kompaund reakció mechanizmus részesedésére felső korlátot megadni (70%, illetve 80%) és ezzel a kilépő neutronok közötti szög- és energia-korrelációk szükségszerű létezésére következtetni (V.).
- b) Foglalkoztunk az úgynevezett héj-effektusok problémájával az $(n, 2n)$ magreakcióban. *Jéki Lászlóval* közösen a 14 MeV körüli energiákon mért $(n, 2n)$ hatáskeresztmetszet adatokat vizsgáltuk és megmutattuk, hogy a jelenlegi kísérleti adatok nem mutatják a nívósűrűség héj-effektusát, sőt a páraenergia esetleges héj-effektusára sem lehet következtetni [A69], (IV. 2. §).
- c) Sikerült megoldanunk a rugalmas szórás úgynevezett „kisszögű anomáliáját” [A66], [A66a], [A68], [A68a]. A problémát szovjet kutatók azon kísérleti tapasztalata vetette fel, hogy gyorsneutronoknak U, Th és Pu magokon való rugalmas szórásánál a kisszögek tartományában neutrontöbbség jelentkezik, az egyéb magoknál sikeresen alkalmazott diffrakciós modellhez képest.

Két kísérletet végeztünk (VI):

1. Megvizsgáltuk az urán-mag gyorsneutronokkal indukált alfa bomlását: az $^{238}\text{U}(n, \alpha n')^{234}\text{Th}$ reakció létezését. Megmutattuk, hogy a feltételezéssel ellentétben ez a reakció nem lehet felelős a kis szögekben tapasztalt neutron

* Foglalkoztunk és eredményeket értünk el 14 MeV energiájú neutronokkal gerjesztett rövid élettartamú izomér átmenetek vizsgálatával is. De ezen kísérletek tárgyalását a disszertációban mellőztem, tekintve, hogy alig függ össze a B. részben tárgyalt többi problémával.

többletért. E reakcióra vonatkozó kísérletünk egyben megmutatta, hogy az irodalomban feltételezett „indukált hasadás” sem magyarázza az anomáliát.

2. Széles szögtartományban mértük a rugalmas szórászt urán targeten. Ezen kísérlet kiértékelésénél gondosan figyelembe vettük az alacsonyan fekvő rotációs nivókat gerjesztő inelasztikusan szórt neutronok járulékát. Ezzel és megfelelő optikai modell analízissel sikerült a rugalmas szórászt a teljes szögtartományban kielégítően értelmezni. Megmutattuk, hogy anomália 14 MeV energiajú neutronokra az urán esetében nem létezik.

- d) Régóta ismert tény, hogy 14 MeV neutron rugalmatlan szórását nem lehet teljes mértékben a kompaund elmélet, illetve a statisztikus modell alapján leírni. A rugalmatlan szórt neutronok spektrumában, előre irányuló szögekben a nagy energiajú szórt neutronok száma sokszorosa a statisztikus elmélet alapján várható értéknek. Satchler és mások egy sereg magnál megmutatták, hogy a magok kollektív állapotai rövid hatótávolságú nukleáris kölcsönhatásokkal neutronokkal is gerjeszthetők, ami ezen direkt járulékot magyarázza. Ilyen vizsgálatokat végeztünk mi is ^{32}S 2,24 MeV-es 2^+ , valamint a ^{56}Fe 0,845 MeV-es 2^+ nivójának gerjesztésére vonatkozólag [A71a]. A mért szögeloszlásokat csatornacsatolásos számításokkal értékeltük ki, illetve a ^{32}S esetében DWBA számításokkal is. Az elméletileg számolt és mért szögeloszlások megegyezése kielégítő, a kapott deformációs paraméter értékek megegyeznek az elektromágneses átmenetekből meghatározott értékekkel (VII.).

A)

KÍSÉRLETI MÓDSZEREK ÉS TECHNIKA

II. A visszalökött protonok módszere

A gyors neutronok energiameghatározására a magspektroszkópia legnehezebb kísérleti feladatai közé tartozik. A neutronok anyagon való áthaladásnál ionizációt nem keltenek, ezért a detektálás közvetve a neutronokkal létrehozott magreakciók termékeinek regisztrálása útján történik. Az eljárások többségében a legegyszerűbb kölcsönhatást, a rugalmas szórászt használják fel és a visszalökött protonokat detektálják.

A proton-neutronszórás alábbi formuláiban a következő jelöléseket alkalmazzuk:

E	neutronenergia ütközés előtt	} laboratóriumi rendszerben
E'	neutronenergia ütközés után	
E_p	a visszalökött protonok energiája	
φ	a protonkilépés szöge a beeső neutron irányához	
Θ	a neutronkilépés szöge a beeső neutron irányához	
$\sigma(E)$	a neutron rugalmas szórásának totális hatáskeresztmetszete	
$\sigma\varphi(E)$	a protonkilépés differenciális hatáskeresztmetszete	
$\sigma_\Theta(E)$	a neutron rugalmas szórásának differenciális hatáskeresztmetszete	

ψ a neutronkilépés szöge
 $\sigma_\psi(E)$ a neutronszórás differenciális hatáskeresztmetszete

} tömegközépponti rendszerben

A rugalmas ütközés kinematikai összefüggései alapján:

$$E_p = E \cos^2 \varphi \quad \text{és} \quad E' = E \cos^2 \Theta \quad (1)$$

$$\Theta = \frac{\pi}{2} - \varphi = \frac{1}{2} \psi$$

$$\begin{aligned} \sigma_\varphi(E) &= 4\sigma_\psi(E) \cos \varphi \\ \sigma_\Theta E &= 4\sigma_\psi(E) \cos \Theta \end{aligned} \quad (2)$$

E energiájú neutronok által létrehozott visszalökött protonok energiaeioszlása:

$$\begin{aligned} W(E_p) dE_p &= \frac{\sigma_\psi(E)}{\sigma(E)} 2\pi \sin \psi d\psi = \frac{\sigma_\psi(E)}{\sigma(E)} \frac{4\pi}{E} dE_p \quad \text{ha} \quad E_p \leq E \\ W(E_p) dE_p &= 0 \quad \text{ha} \quad E_p > E \end{aligned} \quad (3)$$

$f(E)$ primér energiaspektrum esetén a visszalökött protonok energiaeioszlása:

$$W(E_p) dE_p = \text{const} dE_p \int_{E_p}^{\infty} \frac{\sigma_\psi(E) f(E) dE}{E} \quad (4)$$

A neutron-proton ütközés a tömegközépponti rendszerben a tapasztalat szerint kb. 10 MeV-ig izotróp:

$$\sigma_\psi(E) = \frac{\sigma(E)}{4\pi} \quad E < 10 \text{ MeV}$$

Ennek figyelembevételével (3) és (4) leegyszerűsödik.

Monoenergiás forrásra:

$$\begin{aligned} W(E_p) dE_p &= \frac{dE_p}{E} \quad \text{ha} \quad E_p \leq E \\ W(E_p) dE_p &= 0 \quad \text{ha} \quad E_p > E \end{aligned} \quad (3a)$$

Ez a 0— E intervallumban konstans ún. téglalap-spektrum. $f(E)$ primér neutron-spektrum esetén a protonok spektruma egymásra szuperonált téglalapspektrumokból áll:

$$W(E_p) dE_p = \text{const} dE_p \int_{E_p}^{\infty} \frac{f(E) \sigma(E) dE}{E} \quad (4a)$$

(4a) differenciálásával:

$$f(E) dE = \text{const} \frac{E}{\sigma(E)} \left[\frac{dW(E_p)}{dE_p} \right]_{E_p=E} dE \quad (5)$$

Tehát a visszalökött protonok spektruma alapján differenciálással megkapjuk a neutronok energiaspektrumát. A gyakorlatban azonban számos kísérleti effektus a téglalap-spektrumok torzulását eredményezi, amiért ez a módszer csak néhány egyszerű esetben alkalmazható, ha jól elkülönülő monoenergiás neutroncsoportokról van szó. Általános esetben a neutronspektrumot a protonok adott szög alatt mért spektrumából kell meghatározni:

$$W(E_p) = \text{const } \sigma_\varphi(E) f(E) dE \quad (6)$$

Ebből (1) felhasználásával:

$$f(E) dE = \text{const } \frac{W(E \cos^2 \varphi)}{\sigma_\varphi(E)} \quad (7)$$

Tehát a protonok adott szögben mért energiaspektrumából a protonkeltés differenciális hatáskeresztmetszetének ismeretében közvetlenül megkapjuk a neutronspektrumot. Azon berendezésekben, amelyek a differenciális protonspektrum meghatározását használják fel neutronspektroszkópiára, az ún. proton-teleszkópokban, szűk térszögben előre szóródott neutronokat mérik. $\varphi \approx 0^\circ$ választásánál E_p maximális és egyben a véges térszög miatti energiaszórás is minimum.

10 MeV fölötti neutronenergiánál a neutron-protonszórás izotrópia fokozatosan romlik. Bame *et. al.* [Ba57] félempirikus formulát adnak meg, ami ~ 100 MeV-ig jól írja le a differenciális hatáskeresztmetszet alakját:

$$\sigma_\psi(E) = \frac{\sigma(E)}{4\pi} \left[\frac{1 + 2 \left(\frac{E}{90} \right)^2 \cos^2 \psi}{1 + \frac{2}{3} \left(\frac{E}{90} \right)^2} \right] \quad (8)$$

A totális hatáskeresztmetszet energiafüggésének leírására ugyancsak félempirikus formulát készítettek. 14 MeV neutronenergia környékén ennek egy egyszerűbb közelítő kifejezését alkalmazhatjuk:

$$\sigma(E) = \frac{4,83}{\sqrt{E}} - 0,578 \quad (9)$$

ahol az energiát MeV-ben kell behelyettesíteni és $\sigma(E)$ -t barn-ban kapjuk meg.

III. Repülési-idő-spektrométer

1. §. A repülési-idő-módszer

A neutronenergiának a repülési időből való megállapítása a neutronspektroszkópia legdirektebb módszere. A repülési idő és az energia között egyszerű összefüggés áll fenn.

$$t = \frac{72,3L}{\sqrt{E}} \quad (1)$$

ahol t a repülési idő nsec-ban, L a repülési távolság m-ben és E az energia MeV-ben.

Az energiaspektrumot a repülési-idő-eloszlásból az

$$W(E) dE = f(t) dt$$

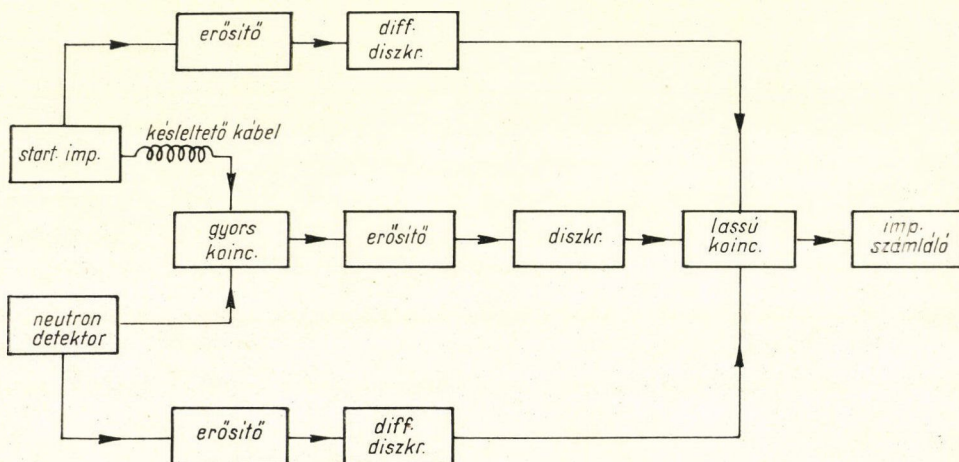
összefüggés és (1) alapján kapjuk meg:

$$W(E)dE = 0,957 \cdot 10^{-4} L t^3 f(t) dE. \quad (2)$$

A repülési-idő meghatározásához ismerni kell a „zérus” időpontot, vagyis a neutronok kilépési időpontját és a megérkezés időpontját. Utóbbit a pálya végén elhelyezett neutrontetektor impulzusa adja meg. A kezdeti időpont megállapítása két módon történhet:

1. A neutronok valamely magreakció termékeként gyorsított ionnyaláb hatására lépnek ki. Az ionnyaláb modulálásával biztosítjuk, hogy a targetet csak impulzusokban éri az ionáram és ezáltal a neutrontermelés is csak impulzusokban történjen. A neutronkilépés időpontját az ionimpulzussal szinkron elektromos impulzus szolgáltatja. (Pulzált módszer.)
2. A ${}^3\text{H}(d, n){}^4\text{He}$ neutronforrásoknál előnyös a neutronokkal együtt keletkező alfák detektálása. Az alfa-detektor impulzusa szolgáltatja a zérus időpontot. (Alfa-módszer.)

Az 1. ábrán a repülési-idő-spektrométer elvi blokksémája látható, egysatornás esetben. A rendszer lényegében egy ún. gyors-lassú koincidenca-berendezés. A repülési-időt a gyors koincidenzába beépített változtatható késleltetés méri. A mért



1. ábra. Egysatornás repülési-idő-spektrométer blokksémája

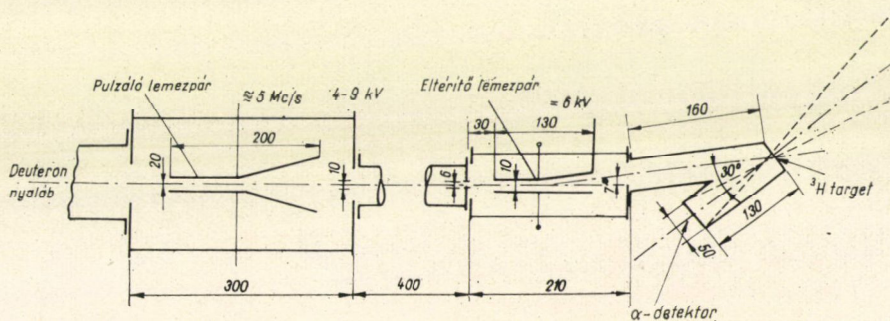
időeloszlás zérus időpontját a formáló körök, indulási szintek stb. által okozott fix késés miatt hitelesítéssel kell megállapítani. Ez történhet ismert energiájú neutronokkal, pl. a forrás monoenergiás neutronjainak ismert repülési ideje alapján. Ha a neutronok reakciótargetből lépnek ki, vagyis nem monoenergiás, szekundér neutronokról van szó, a zérus időpontot a rugalmasan szórt neutroncsúcs, vagy

a prompt gamma-csúcs alapján állapítják meg. Az oldalágra és a lassú koinciden-ciára nincs feltétlenül szükség, de a gyakorlatban legtöbb esetben igen hasznos a neutron-küszöbenergia (alsó vágás) és a maximális neutronenergia (felső vágás) kijelölésére, valamint az időfelbontás javítása érdekében.

A repülési-idő-módszerben az egyetlen adekvát eszköz a neutronok regisztrálására a szcintillációs detektor. Szcintillátorként magas hidrogén-tartalmú szerves anyagokat használnak. A detektálási elv ugyanaz, mint az ionizációs kamráknál: a meg-lökött protonok impulzusait regisztráljuk. Ugyanúgy, mint az ionizációs kamránál, az amplitúdó-spektrum alapján tájékozódni lehet a neutronok energiájáról, néhány jól elkülönült monoenergiás neutroncsoport esetén az energiákat a proton-spektrum alapján is megállapíthatjuk. A szcintillációs neutrontetektor előnye a nagy határfok és a gyorsaság. Hátránya a nagy gamma-érzékenység. A döntő körülmény a szcin-tillációs folyamat gyorsasága, ez határozza meg a repülési-időmérés pontosságát és ezzel az energiamérésben elérhető pontosságot.

2. §. A pulzált módszer

Rövid neutronimpulzusok előállítása gyorsítók esetében az ionnyaláb pulzálásá-val történik. Az ionimpulzus és a neutronimpulzus időben teljesen egybeesik, tekintve, hogy az ionok lelassulási ideje a targetben és a neutrontermelő magreakció ideje elhanyagolhatóan kicsi. Elvben az az előnyös, ha az impulzus minél rövidebb, hiszen ez fontos tényezője az energiamérés hibájának. Azonban az impulzus időtartamának csökkentése általában az átlagintenzitás csökkenésével és a mérési idő növekedésével jár. Ezért az impulzus-időtartam rövidítésének csak addig van gyakorlati haszna, amíg ez a regisztráló rendszer időfelbontása körüli értéket eléri. A gyakorlatban 1 nsec alatti impulzus-időtartamot nem alkalmaznak még olyan berendezésekben sem, ahol ez technikailag megvalósítható.



2. ábra. Elektrodák elhelyezése a gyorsítócsőben pulzálás esetében

Az ionnyaláb pulzálásának egyszerű és elterjedt módszerét alkalmaztuk [Ne 60]. A jól fókuszált ionnyaláb eltérítő lemezpár között halad át. A lemezekre 5 Mc frekvenciájú, 4–9 kV csúcsértékű szinuszos feszültséget kapcsoltunk. Az eltérített nyaláb rés előtt halad át. Minden periódusban kétszer, a zérus átmenetek környékén a nyaláb átjut a résen (2. ábra). Az impulzus időtartama az eltérítő feszültség ampli-

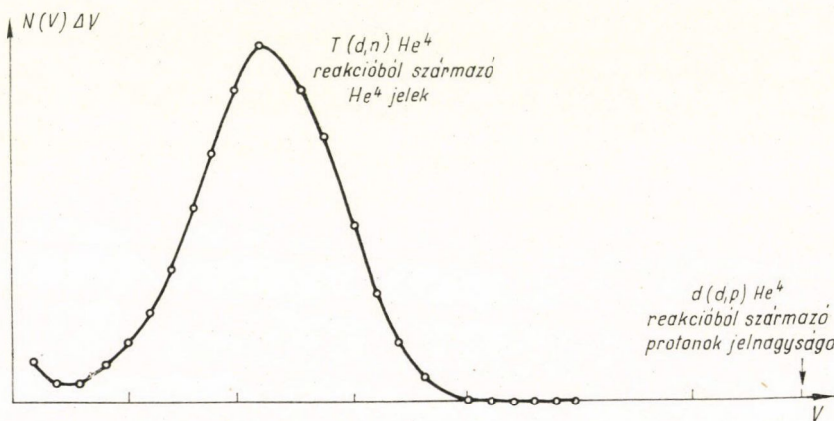
túdójával és a rés méretével szabályozható. A semleges deutérium ionok folytonos hátteret okoznak. Ennek kiküszöbölésére külön konstans eltérítést alkalmaztunk egy másik lemezpár segítségével.

Az impulzusok minimális időtartama 1,2 nanoszekundum volt. Ilyenkor a gyorsító maximális áramának 1,2/100-ad részét hasznosítjuk. Az áram túlnyomó része a résre és a gyorsító falára verődik, ahol „selbst” targetet és a ${}^2\text{H}(d, n){}^3\text{He}$ reakció útján magas ~ 3 MeV energiájú folytonos neutronhátteret hoz létre.

A pulzált módszer hátrányait a kis kitöltési tényező és a selbst-target háttér képezik. Ezek kiküszöbölésére több módszert dolgoztak ki. A probléma legigényesebb megoldását az ún. bunching-módszer jelenti. Ebben viszonylag hosszú ionpulzusokat állítanak elő lemezpárral való szaggatás útján, amit rádiófrekvenciával úgy modulálnak, hogy az ionok rövid impulzusokba tömörülten érkeznek a targetre. A selbst-target effektust nagyrészt kiküszöböli az, hogy a pulzáló lemezpárt közvetlenül az ionforrás után a gyorsítócső előtt helyezik el. Így a falra verődő ionok egyrészt a kis energia miatt kevés selbst-target-neutront keltenek, másrészt a selbst-target-forrás messze kerül a detektoroktól és a gyorsítót, valamint a targetteret elválasztó betonvédelem is leárnyékolja a selbst-target-neutronokat.

3. §. Az alfa-módszer

A $\text{H}(d, n)\text{He}$ neutrontermelő magreakció alkalmazásánál számos előnye van a visszalökött alfák detektálásának [A64]. A detektált alfák iránya egyértelműen kijelöli a neutronirányt: csak az alfa-detektor térszöge által definiált neutronok hoz-



3. ábra. A ${}^3\text{H}(d, n){}^4\text{He}$ reakcióban visszalökött alfák amplitúdóspektruma

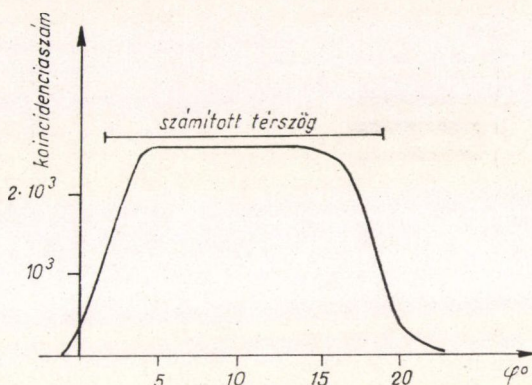
hatnak létre szisztematikus neutron-alfa-koincidenciákat. Ez lényegesen megváltoztatja a kollimálás problémáit, ami nagyon fontos előny, hiszen mint ismeretes, 14 MeV-os neutronoknál a hatásos kollimátor csak igen nagy méretekkkel, méter nagyságrendű betonfalakkal oldható meg. Ez a költségeken felül azzal jár, hogy a több detektort igénylő problémák vizsgálatát gyakorlatilag megvalósíthatatlanná teszi.

A gyors neutronokkal végzendő munkák céljára épített gyorsítónk [A 60] feszültségforrása egy 200 kV Cockroft—Walton generátor. Az alfadetektor elhelyezése a 2. ábrán látható. Az alfákat 0,1 mm vastagságú plastik szcintillátorral detektáljuk. 150° -nál $E_d = 150$ KeV $E_n = 14,77$ MeV $E_\alpha = 4,13$ MeV. 270° -os alfa-detektort is alkalmaztunk, ennél az elhelyezésnél a legkisebb a véges neutrontérszög miatti energiaszórás. Alumíniummal begőzölt polietilén fólia gondoskodik az elektronsokszorozó fényzárásáról a gyorsító felől. Ez a réteg egyben elnyeli a rugalmasan szórt deutériumnyalábot, valamint a trícium-target bétáit. A polietilén réteg vastagsága $6 \mu\text{g}/\text{cm}^2$, a rágőzölt alumínium $3\text{--}5 \mu\text{g}/\text{cm}^2$.

A 3. ábrán az alfák amplitúdóspektruma látható. Az alfa-csúcs jól elkülönül a zajtól. Használat közben a targetbe deutérium épül be, ami egy másik csúcs fellépésére vezet. Ez a ${}^2\text{H}(d, p){}^3\text{H}$ protonjaitól származik. A csúcs amplitúdója a target öregedésével növekszik. Az alfa-detektálás hatásfoka $\sim 100\%$.

Az alfa-impulzusok száma közvetlenül megadja a neutronhozamot, amit az alfa-csúcsra ráhelyezett kapuval regisztrálunk.

Az alfák és ezzel a neutrontérszög pontos definiálását a trícium-target előtt elhelyezett koncentrikus blendék biztosítják. A nyaláb a trícium-targetnek kis részét ~ 2 mm átmérőjű kör felületét exponálja. A trícium-target jó kihasználását a target forgatásával értük el. A 4. ábrán a neutron-alfa koincidenenciákkal kimért térszög látható.

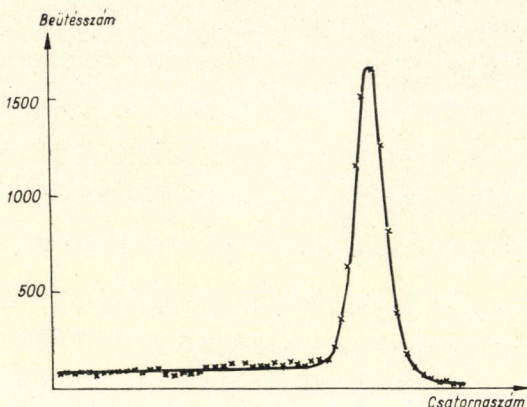


4. ábra. Neutron-alfa koincidenenciákkal kimért térszög

4. §. A pulzálás és az alfa-módszer kombinálása

Az alfa-módszernél az alkalmazható neutronintenzitást a véletlen koincidenciák korlátozzák. A pulzált módszernél az intenzitás olyan nagy lehet, amennyit a berendezés teljesítőképessége, vagy a detektor terhelhetősége megenged. Pulzálásnál azonban a véletlen koincidenciák helyett a különböző irányokban a padlóról, a szerelvényekről stb. szóródó neutronok szisztematikus koincidenciákat adnak a start-impulzusokkal és ezt a háttérrel kell figyelembe venni.

Jelentős javulást értünk el a két módszer kombinálásával. [A 64a]. Ez abban áll, hogy az alfa-módszer berendezéseivel mérünk, de a nyalábot pulzáljuk. Ezzel a két módszer előnyeit kombináljuk. Az alfa-módszerben a véletlen koincidenciákat nagyrészt a detektorra beeső primér neutronok hozzák létre. Pulzált nyalábbal azonban a primér neutronok impulzusai azonos időnél jelennek meg, a 14 MeV-os neutronok repülési idejének megfelelő helyen. Így az eredetileg egyenletes eloszlású véletlen koincidenciák most egy csúcsban tömörülnek.



5. ábra. Alfa-neutron véletlen koincidenciák időeloszlása pulzálásnál

Az 5. ábrán a véletlen alfa-neutron koincidenciák időeloszlása látható pulzálásnál. A csúcs alakja a neutronimpulzusból és az időfelbontási görbéből alakul ki.

A pulzált módszerben rövid neutronimpulzust kell választani az időmérés pontossága érdekében. A két módszer kombinálásával a neutroncsomagot általában hosszabbnak választhatjuk, megnövelve ezzel az átlagintenzitást és csökkentve a selbsttarget-effektust. A neutroncsomag hossza, tekintve, hogy az időmérést az alfa-impulzussal végezzük, nem játszik szerepet az energiefelbontásban, a neutron-impulzus hosszát a maximális regisztrálható energia és az alkalmazott repülési távolság alapján kell megállapítani úgy, hogy a véletlen csúcs kívül essen a mérendő tartományon.

5. §. A háttér

A gyorsneutron-kísérletek hosszú mérési időt igényelnek, ezért fokozott figyelmet érdemel az elérhető effektus/háttér-viszony kérdése. A háttér a reakciótarget térszögén kívül fellépő forrásneutronoktól és a selbst-target-neutronoktól származik. Ezek a környező anyagokban (falak, padló, szerelvények, levegő) többszörös ütközést és ezáltal energiacsökkenést szenvednek. A detektorba bejutó többször szórt neutronok az alfamódszernél véletlen koincidenciákat, a pulzálásnál szisztematikus háttérkoincidenciákat okoznak.

A termelt neutronok többsége végül termalizálódik és befogódik. A neutronok bolyongásuk során gamma-sugárzást keltenek, az inelasztikus ütközéseket és a befogást kísérő gammákat. Bár a szcintillációs mechanizmus lehetővé teszi, hogy jelalak-diszkrimináció segítségével a gamma-háttérrel kiküszöböljük, ez azonban alacsony energiánál nem alkalmazható és ezért a háttér vizsgálatánál a gamma-sugárzást is figyelembe kell venni.

Tekintsük a 6. ábrán látható amplitúdó-spektrumokat. Az alsó görbe direkt neutronoktól származik. Úgy kaptuk, hogy az amplitúdó-analizátort az alfa-neutron repülési csúccsal kapuztuk. A felső görbe a detektort érő valamennyi részecske által kiváltott amplitúdó-eloszlás. Ha a detektortérszögben árnyékolást alkalmazunk, a direkt-neutronok által okozott beütésszám:

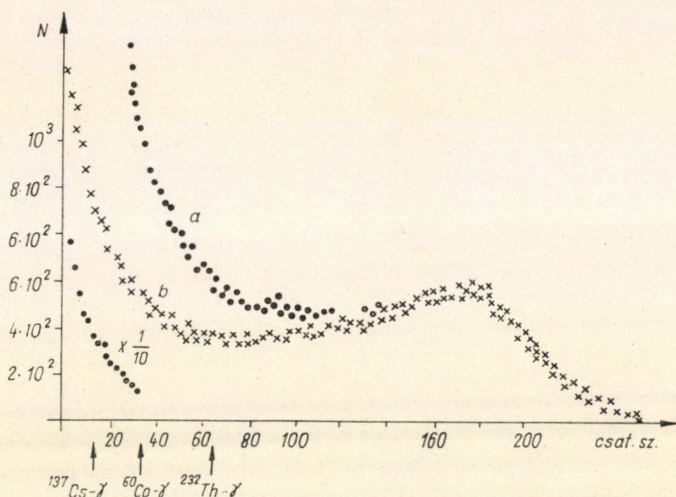
$$N_d = N_0 \Omega_n t \varepsilon_0$$

ahol ε_0 a detektor hatásfoka primér-neutronokra, N_0 a neutronhozam, t a detektor-árnyékolás attenuációs tényezője. A két görbe alatti terület különbsége alapján definiáljuk a szórt háttér-faktort, a háttér-beütésszám és a forrásból direkt a detektorba

jutó neutronok által létrehozott beütésszámok viszonyaként:

$$\chi = \frac{N_{\text{összes}} - N_d}{N_d}$$

χ erősen függ az energiaküszöb megválasztásától, a forrás-detektor-távolságtól, a detektor környezetében levő anyagoktól, elsősorban a padló és a falak távolságától, valamint a selbst-target-effektus miatt a deutérium-nyaláb fókuszáltságától.



6. ábra. Alsó görbe a 14 MeV-os neutronok amplitúdóspektruma alfa-neutron repülési csúccsal kapuzva, a felső görbe a 14 MeV-os neutronok és a háttér amplitúdóspektruma (kapuzás nélkül)

Pulzálásnál az áram folyamatos komponensére kell nagy figyelmet fordítani. Ez azon részecskék árama, amelyek a gyorsítás és az analizálandó mágnesen való áthaladásnál még töltéssel rendelkeznek, de az eltérítő lemezpár között már semlegesek. Ezt a komponenszt bizonyos mértékben csökkenti a target előtt elhelyezett lemezpár, amellyel egyenfeszültség alkalmazásával töltésválogatást valósítunk meg (2. ábra). A semleges komponens azonban a targetre való haladás során újratöltődhet. Ezért célszerűbb a töltésválogatást és a pulzálást egy helyen, a szaggató lemezpárnál elvégezni. A semleges komponens csökkentése szempontjából a legfontosabb a vákuum jósága. Pl. 10^{-5} Hgmm-nél a pulzusok közötti folyamatos áram és az áramimpulzus amplitúdójának viszonya

$$k = \frac{i_f}{i_p} \approx 6 \cdot 10^{-3} \quad \text{és} \quad 10^{-4} \text{ Hgmm-nél } k \approx 5 \cdot 10^{-2}$$

A különböző módszereket, ekvivalens viszonyok között kell összehasonlítani: valamely effektus meghatározásához szükséges regisztrálási idő alapján azonos relatív hiba és azonos effektus/háttér viszony esetében. Reihmayer [Re62] számítást végzett a pulzálás és az alfa-módszer összehasonlítására, de mindkét esetben azonos

intenzitást tételezett fel: az alfa-módszerben megengedhető maximális intenzitást. Ez vezetett arra a következtetésre, hogy az alfa-módszer sokkal előnyösebb. Ennek a módszernek előnye gyakran az egyszerűségében és a neutronkollimálás kiküszöbölésében áll.

Felírjuk a háttérrel, ill. a véletlen koincidenenciák számát az egyes repülési-idő-módszereknél Δt időcsatornában egységnyi időre. Az azonos relatív hiba és azonos effektus/háttér a különböző módszerekben különböző intenzitásokat szab meg. Az egyes módszerek különböznek a megvalósítható maximális neutronhozam szempontjából is. Feltételezzük, hogy a megkívánt effektus/háttér-viszony biztosításához szükséges neutronhozamok mindegyik módszer esetén megvalósíthatók.

Rugalmas szórás kísérletekben a szórt neutronok energiája megegyezik a bombázó neutronokéval, tehát az időspektrumban az áramimpulzusnak megfelelő időtartományt kell vizsgálni. Rugalmatlan szórásnál, vagy az $(n, 2n)$ magreakció vizsgálatánál az effektus az impulzusok közötti tartományban jelentkezik. A háttérrel tehát célszerű külön a pulzsidőben és külön a pulzusok közötti időben meghatározni. A véletlen koincidenenciák száma az alfa módszernél

$$K_{\alpha}^V = N_0^2 \Omega_{\alpha} \Omega_n (t\epsilon_0 + \chi \bar{\epsilon}_n) \Delta t$$

A véletlen koincidenenciák száma az áramimpulzusnak megfelelő időintervallumban

$$K_{p,p}^V = N_0 \Omega_n [n\tau\epsilon_0 + (\tau n + k) \chi \bar{\epsilon} \tau n],$$

az áramimpulzusok között pedig

$$K_{p,k}^V = N_0 \Omega_n [ntk\epsilon_0 + (\tau n + k) \chi \bar{\epsilon} n] \Delta t.$$

Az alfa-módszer és pulzálás együttes alkalmazásánál pedig az impulzusban és impulzusközökben a véletlen koincidenenciák számát a

$$K_{\alpha+p,p}^V = N_0^2 \Omega_{\alpha} \Omega_n [t\epsilon_0 + (n\tau + k) \bar{\epsilon} \chi] \Delta t$$

$$K_{\alpha+p,k}^V = N_0^2 \Omega_{\alpha} \Omega_n [kte_0 + (n\tau + k) \bar{\epsilon} \chi] (n\tau + k) \Delta t$$

összefüggések adják meg.

Konkrét kísérleti feladatnál a mérés jellemzői a szükséges mérési idő és a jel/háttér viszony: r . P jelölje annak valószínűségét, hogy a vizsgált reakció bekövetkezik a targetben és a szórt i_n repülési idejű neutronok a detektor által kijelölt irányba lépnek ki. Legyen $\bar{i} \leq i_n \leq \bar{i} + \Delta t$ és a detektor megszólalási valószínűsége a szórt neutronokra ϵ , a target neutronforrásra vonatkozó térszöge Ω_t és $\Omega_t = \Omega_{\alpha}$. A megfelelő jel/háttér kifejezések:

Társrészcseke módszernél:

$$r_{\alpha} = \frac{P}{\Delta t} \frac{1}{N_0} \frac{\epsilon}{t\epsilon_0 + \bar{\epsilon} \chi}$$

Pulzálásnál az impulzus alatt

$$r_{p,p} = \frac{P}{\Delta t} \Omega_t \tau \frac{\epsilon}{t\epsilon_0 + (n\tau + k) \bar{\epsilon} \chi}$$

Az impulzusok között:

$$r_{p,k} = \frac{P}{\Delta t} \Omega_t \tau \frac{\epsilon}{kte_0 + (n\tau + k) \bar{\epsilon} \chi}$$

A két módszer kombinálásánál az impulzus alatt

$$r_{\alpha+p,p} = \frac{P}{\Delta t} \frac{1}{N_0} (n\tau + k) \frac{\varepsilon}{t\varepsilon_0 + (n\tau + k)\bar{\varepsilon}\chi}$$

az impulzusok között:

$$r_{\alpha+p,k} = \frac{P}{\Delta t} \frac{1}{N_0} \frac{\varepsilon}{kt\varepsilon_0 + (n\tau + k)\bar{\varepsilon}\chi}$$

Mivel pulzálásnál a jel/háttér független a neutronintenzitástól, a felső intenzitáshatárt N_0^{\max} -t a gyorsító teljesítőképessége szabja meg.

Rugalmas szórás kísérletekben a szórt neutronok energiája megegyezik a bombázó neutronéval, tehát az időspektrumban az áramimpulzusnak megfelelő tartományt vizsgáljuk. Ekkor r_α , $r_{p,p}$ illetve $r_{\alpha+p,p}$ alapján választjuk meg az előnyösebb módszert. Inelasztikus szórás ($n, 2n$) reakciók vizsgálatánál pedig az effektus az impulzusok közötti tartományban jelentkezik, és itt r_α , r_{pk} , illetve $r_{\alpha+p,k}$ játszik szerepet az összehasonlításnál.

Pulzálásnál az effektus/háttér nem függ az intenzitástól, értékét a háttérparaméterek k , t , χ szabják meg. Ezzel szemben az alfa-módszerben és az alfa + pulzálásnál az effektus/háttér fordítva arányos az intenzitással, tehát ugyanazon háttérparaméter értékek mellett jobb, elvben tetszés szerinti effektus/háttér-viszonyt valósíthatunk meg, természetesen a mérési idő rovására.

Olyan esetekben, amikor a detektor geometriai elhelyezése (kis repülési távolság, vagy kis szórési szög) a direkt nyaláb leárnyékolását nem teszi lehetővé, a rugalmas szórás mérésénél mindig az alfa-módszer előnyösebb. Rugalmatlan szórás vizsgálatánál, vagy ($n, 2n$) mérésénél, vagyis, amikor a neutronspektrum az alacsonyabb energiatartományba esik, általában az alfa + pulzálás kombinációja vezet rövidebb regisztrálási időre. A megfelelő mérési módszer kiválasztása, a mérendő effektus nagysága a repülési időspektrum alakja, a geometriai elrendezés és a háttérparaméterek aktuális értéke alapján a fenti képletek felhasználásával könnyen elvégezhető.

6. §. A szcintillációs detektor szerepe az időfelbontásban

Tekintsük először a problémát a következő idealizált kép alapján: az elektron-sokszorozó anódján megjelent feszültségimpulzus lineárisan függ a meglökött protonok energiájától és a szcintillátorban keltett fotonok számától. Statisztikus fluktuációk nem játszanak szerepet. A feszültségimpulzusok alakja megegyezik, csak amplitúdója különböző:

$$V(t) = V_m f(t).$$

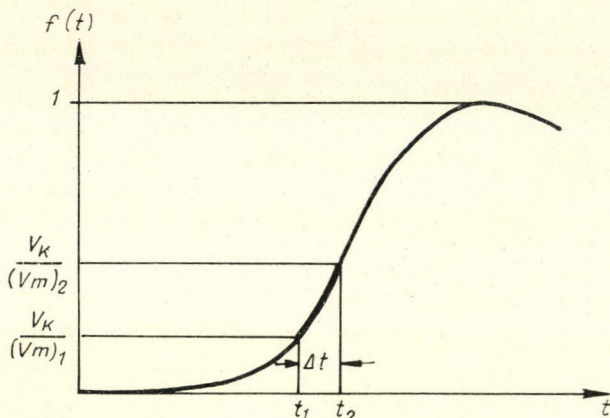
Az anód egy triggeregységhez csatlakozik, amely a bemenetén levő feszültségtől független impulzust állít elő a t_k időpontban, amikor a trigger bemenetén a feszültség eléri az indulási küszöbszintet (V_k). Tegyük fel, hogy a $t=0$ időpontban a szcintillátorban meglökött proton V_k -nál nagyobb amplitúdót hoz létre. Az anódon az impulzus késve, 10–100 nsec múlva fog megjelenni. A késési idő nem játszik szerepet, csak a szórása. A trigger megszólalási időpontja V_m -től és $f(t)$ alakjától függ.

Az időszórás tehát az amplitúdóspektrum határozza meg. Ha az amplitúdók V_1 és V_2 közé esnek, az impulzusok időszórása $\Delta t = t_1 - t_2$ lesz. (Lásd: 7. ábra.) Ha az amplitúdótartomány kicsi

$$V_2 = V_1(1 + \alpha) \quad |\alpha| \ll 1,$$

akkor

$$f(t_2) \approx f(t_1) + \left(\frac{df}{dt} \right)_{t=t_1} \Delta t$$



7. ábra. A trigger indulási küszöb feszültségének időszórása a véges amplitúdótartomány következtében

Fenti összefüggések alapján:

$$\Delta t = \frac{\alpha}{\left(\frac{d}{dt} \ln \frac{V}{V_m} \right)_{V=V_1}}$$

Tehát szűk amplitúdótartomány esetén a felbontási idő az $f(t)$ logaritmikus deriváltjának reciprokával arányos az $f(t) = V_K/V_1$ helyen. Véges amplitúdótartományban ezen kifejezés effektív értékét kell képezni.

Tekintsük a szcintilláció lefolyását meghatározó tényezőket:

1. A szcintillátor gerjesztési ideje, vagyis a meglökött protonok lefékezéséhez szükséges idő. Ez 14 MeV energiájú neutronoknál még elhanyagolható, de magasabb energiáknál szerepet játszhat. Pl.: 30 MeV-nél ez az idő $\sim 0,1$ nsec.
2. A szcintilláció utánvilágítása. A fénykibocsátás „lecsengése” szerves szcintillátorokban közelítőleg exponenciális alakú, tehát az emisszió a gerjesztés időpontjában a legnagyobb. Gyors szcintillátorokban pl. NE 102-re, amit a gyors-neutron-spektrométerekben gyakran alkalmaznak, a lecsengési időállandó néhány nsec.
3. A fotonok begyűjtésének időszórása a szcintillátorokban. Ez közelítőleg exponenciális függvénye a szcintillátor méreteinek. Kis szcintillátor méretei-

nél elhanyagolható, de nagyméretű szcintillátornál fontos összetevője a teljes időszórásnak.

4. A fotoelektronok időszórása az első dinódáig. Ez a tényező jelentős szerepet játszik. A fotokatód közepén és szélén kiváltott fotoelektronok repülési idejének különbsége az első dinódáig 56 AVP elektronsokszorozónál 0,3 nsec, ami gyakorlatilag az elektronsokszorozó teljes időszórása.
5. A dinódákból kilépő szekundér elektronok repülésének időszórása, amely mint láttuk, a fotoelektronoké mellett elhanyagolható.

Az 1—5 tényezők eredője az áramimpulzus alakját határozza meg. A feszültségimpulzus alakja az anódkör, illetve a triggeregység bemenetén levő RC integrálókörök időállandójától függ. A feszültségimpulzus meredeksége érdekében az anód és a triggerbemenet szórt kapacitásainak minimumnak kell lenniök. A logaritmikus deriváltban az egyes tényezők külön-külön hatnak. Belátható, hogy minél közelebb vagyunk az $f(t)$ görbe elejéhez, annál kisebb lesz a véges amplitúdótartomány szerepe az időszórásban. A logaritmikus deriváltak értéke az $f(t)$ függvény vége felé erősen nő az amplitúdótartomány növelésével. Az időszórás már alig függ az amplitúdótartomány nagyságától, gyakorlatilag az indulási küszöbfeszültség V_k értéke határozza meg.

A tényleges időszórásban a szcintilláció nonlinearitása miatt a kis amplitúdók viszonylag nagyobb szerepet játszanak. Ezért is a felbontás lényegében az alsó szinttől fog függeni. A trigger adott V_k küszöbérzékenységeénél az időszórás annál kisebb, minél nagyobb az elektronsokszorozó erősítése.

A felbontási idő javításának az effektív küszöbérzékenység csökkentése útján a fotoelektronsokszorozó sokszorozásának statisztikus jellege szab határt. Kézenfekvő, hogy a statisztikus fluktuációban az elektronsokszorozó bemenete játssza a főszerepet. A küszöbérzékenység szintjének az egy fotoelektronnak megfelelő feszültség szint alá való csökkentésével a felbontási idő már nem csökken. Az érzékenységi szint csökkentését nemcsak a statisztikus fluktuáció korlátozza, hanem technikai tényezők is. Ha a gyors trigger indulási szintje sokkal alacsonyabb, mint a lassú ág diszkriminálási szintje, a nem regisztrált impulzusok fölösleges terhelést okoznak az analizátorban. Egy fotoelektronnak megfelelő feszültség szint környékén a terhelés ugrásszerűen megnövekszik a fotoelektronsokszorozó sötét árama miatt. Ezért a küszöb megválasztásánál gondoskodni kell arról, hogy a zajimpulzusok ne jussanak be a gyors triggeregységbe.

Tekintsük a statisztikus fluktuáció szerepét az alábbi idealizált kép alapján:

1. A szcintillátor gerjesztési idejét és a fénybegyűjtési időt a fotokatódra elhanyagoljuk.
2. Elhanyagoljuk az elektronsokszorozón való áthaladás során fellépő időszórást.
3. Feltételezzük, hogy a szcintillátor emissiója egyetlen exponenciális tagból áll:

$$N(t) = P(1 - e^{-t/\tau_0})$$

ahol P a pulzusban emittált összes fotonok száma, τ_0 a lecsengési időállandó. Legyen a gyors trigger indulási szintje Q fotoelektron. ($Q \sim V_k$.)

A fotoelektron kilépésének időszórása [Ri58]

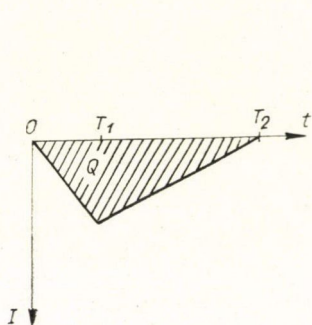
$$\Delta t \approx \frac{\tau_0}{R} \sqrt{Q} \left[1 + \frac{Q+1}{R} + \left(\frac{Q+1}{R} \right)^2 + \dots \right]; \quad \frac{Q+1}{R} \ll 1$$

ahol $R = P\kappa_1\kappa_2\xi$ az első dinódára menő fotoelektronok száma. κ_1 a fénybegyűjtési tényező a fotokatódra, κ_2 a fotoelektronok begyűjtési tényezője az első dinódára, ξ a kvantumhatásfok. A képlet alapján világos, hogy a statisztikus fluktuációkból adódó időszórás akkor lesz kicsi, ha

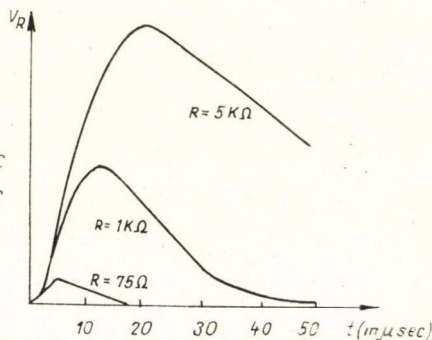
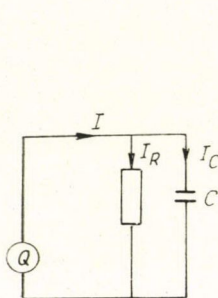
- τ_0/P kicsi, vagyis sok foton lép ki a szcintilláció kezdetén.
- Jó a fénybegyűjtés. A szcintillátor átlátszó az emittált spektrumra, nagy a fotokatód felülete a szcintillátorra vonatkozólag, jó a fényreflexió a szcintillátor falain és végül jó a törésmutató-illesztés a szcintillátor és a fotokatód között.
- Magas a kvantumhatásfok.
- Jó az elektronbegyűjtés az első dinódára. Hasonlóan fontos a magas szekundéremisszió és a jó elektronbegyűjtés a dinódákra, különösen az első dinódák esetén.
- Alacsony, egységhez közeli Q érték.

7. §. Az impulzusok formálása

A repülési-idő-spektrométer egyszerű egycsatornás esetben egy ún. gyors-lassú koincidencia-berendezés. A felbontóképesség tényezői között jelentős szerepe van az elektronsokszorozó impulzusai formálásának, valamint a koincidencia-kör tulajdonságainak.*



8. ábra. A feszültségimpulzus-alak számításánál feltételezett áramimpulzus-alak és a helyettesítő áramgenerátor



9. ábra. Az elektronsokszorozó anódján megjelenő feszültségimpulzus alakja $C = 10$ pF anódköri kapacitással számolva

* Repülési-idő-spektrométerünket az évek során állandóan fejlesztettük, tökéletesítettük. Az első méréseknél gyorskoincidencia-berendezést és RCA 6810-A multipliert használtunk. Kezdetben az elért időfelbontás $2\tau = 8$ nsec volt. Az 56 AVP, majd az XP 1020 elektronsokszorozók megjelenése után ezekre tértünk át. Közben az elektronikát is fejlesztettük, így az elért felbontási idő folyamatosan javult 8 nsec-ről ~ 1 nsec-ra. A disszertációban előforduló különböző felbontási idő-adatoknak ez a magyarázata.

A gyorskoincidencia-kör helyett a későbbiekben különböző típusú idő-amplitúdó-konvertereket alkalmaztunk. Az impulzusformálás terén is módosításokat végeztünk. Az időfelbontást meghatározó problémák ezekben a különböző megoldásokban azonos módon merülnek fel. Ezeket a vizsgálatokat az eredeti elrendezésben, amelyben a leírt kísérleteket elvégeztük, az ott nyert adatokkal tárgyaljuk.

Az elektronsokszorozó impulzusainak vizsgálatánál tekintsük az elektronsokszorozót egy Q össztöltést adó áramgenerátornak, amely a cső R munkaellenállására és az ezzel párhuzamos C szórt kapacitásra dolgozik. Az áramimpulzus alakjáról tételezzük fel, hogy lineárisan növekszik zérusról $(0, T_1)$ -ben és innen lineárisan csökken (T_1, T_2) -ben (8. ábra). Ezen feltevés alkalmazhatóságáról oszcilloszkóp segítségével győződünk meg. A KFKI-ban készült plasztik szcintillátor és RCA 6810-A elektron-sokszorozónál: Q össztöltéstől gyakorlatilag függetlenül $\tau_1 \approx 20$ nsec. Ezen adatokkal meghatároztuk az anódon megjelenő feszültségimpulzusok alakját különböző R munkaellenállások és $C=10$ pF esetén (9. ábra).

A jó időfelbontás érdekében az szükséges, hogy a jel a lehető legrövidebb idő alatt érje el azt a szintet, ami a koincidencia-kör vezérléséhez szükséges.

Általában minden Q értékhez tartozik egy optimális R , amelynél a jel a legrövidebb idő alatt éri el a koincidencia-berendezés érzékelési szintjét. Amennyiben ez a szint alacsony és Q elég nagy, akkor kis munkaellenállást célszerű alkalmazni. A támasztott követelmények azonban nem felelnek meg ennek (~ 300 keV proton-energia, 4 V kimenő jel), így nagyobb, $R=1$ kOhm munkaellenállást kellett alkalmazni.

Az elektronsokszorozó után az impulzusok formálására egy D3a csövet alkalmaztunk. A cső előfeszültségét úgy állítottuk be, hogy az 50 keV energiájú elektronnak megfelelő jelek már a meredek szakaszukon nyissák ki a csövet és ugyanakkor csak kevés zajimpulzus tudja kivezérelni.

A regisztráló berendezés tranzistorizálása keretében az impulzus formálására is új áramköröket használunk. Míg a korábbi limiter lényegében egy kis vezérlési tartományú túlvezérelt erősítő, ahol a zajimpulzusok levágását az erősítő megfelelő előfeszítésével értük el, az új berendezés egy gyors áramdiszkriminátor. A diszkriminációs szint széles tartományban $100 \mu\text{A}$ -tól 5 mA -ig folyamatosan változtatható. A formált jelek 70 nsec szélesek, a terhelhetőség periodikus impulzusokra 5 Mc .

8. §. A koincidenciakör vizsgálata

A koincidenciakör [A62] lényegében a De Benedetti és Richings [Be52] által leírt kapcsolás, amelynek működési elve a következő: amíg egyik oldalon sincs jel, a D_1 és D_2 diódák (10. ábra) vezetnek és az A pont feszültsége

$$V \frac{r/2}{R+r/2} \approx \frac{r}{2R}$$

ahol $r \ll R$ a diódák vezetési ellenállása. Ha valamelyik oldalra jel érkezik, amely t_1 ideig tartja lezárva a diódát, akkor a lezárás pillanatában az A pont feszültsége a $\frac{V_r}{R+r} \approx \frac{V_r}{R}$ értékre ugrana. Ez a feszültségugrás azonban a jelenlevő C szórt kapacitás miatt csak rC időállandóval tud felnőni, így az egyoldalról jövő jel — a „szingli” jel — nagysága

$$V_{sz} = \frac{V_r}{2R} (1 - e^{-t_1/rC})$$

Ha mindkét bemenetet t_2 ideig tartjuk zárva (általában $t_1 \neq t_2$), akkor a megjelenő feszültségugrás $V - \frac{V_r}{2R} \approx V$, ami azonban csak a jóval nagyobb RC időállandóval növekszik, mivel most mindkét dióda le van zárva. A koincidenciajel nagysága tehát

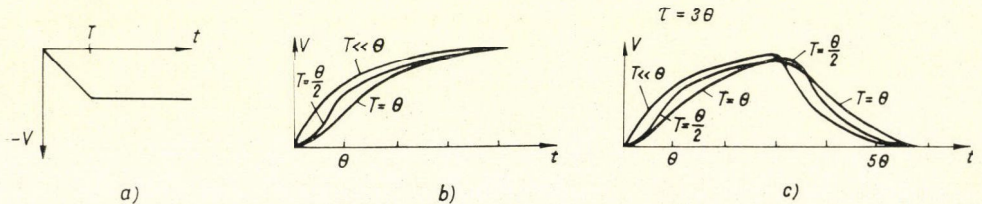
$$V_k = V(1 - e^{-t_2/RC})$$

Ha R -t növeljük, de a berendezés többi részét változtatlanul hagyjuk, akkor a koincidencia-jelek nagysága a szingli jelekhez viszonyítva egyre nő. Másrészt azonban a jó felbontóképesség érdekében R -t nem szabad túl nagyra választani. A koincidenciajeleknek a szingli jelektől való biztonságos megkülönböztethetőségéhez már elegendő, ha pl. $V_k > 2V_{sz}$ ami teljesül, ha

$$R > \frac{r}{1 - e^{-t_2/RC}}$$

10. ábra. A gyors-koincidenciakör elvi rajza

Tegyük fel, hogy ez a feltétel ezentúl mindig teljesül és vizsgáljuk meg, hogyan változik a koincidencia-körrel kijövő jelek amplitúdója az impulzusok t_2 átfedési idejével. Ha a koincidencia-körre tetszőleges alakú, de tökéletesen egyforma impulzusokat vinnénk, akkor a kijövő impulzusok amplitúdója csak az impulzusok t_2 átfedési idejétől függne. Attól függően, hogy milyen nagyság feletti V_2 jeleket detektálunk, 0 és a jelek teljes hossza között bármilyen felbontást elérhetünk. Jó felbontás érdekében előnyös, hogy V_k minél erősebben függjön t -től. Ha a jelek átlagos egybeesési ideje t_0 , akkor ez a függvény az $R = t_0/C$ értéknél a legmeredekebb.

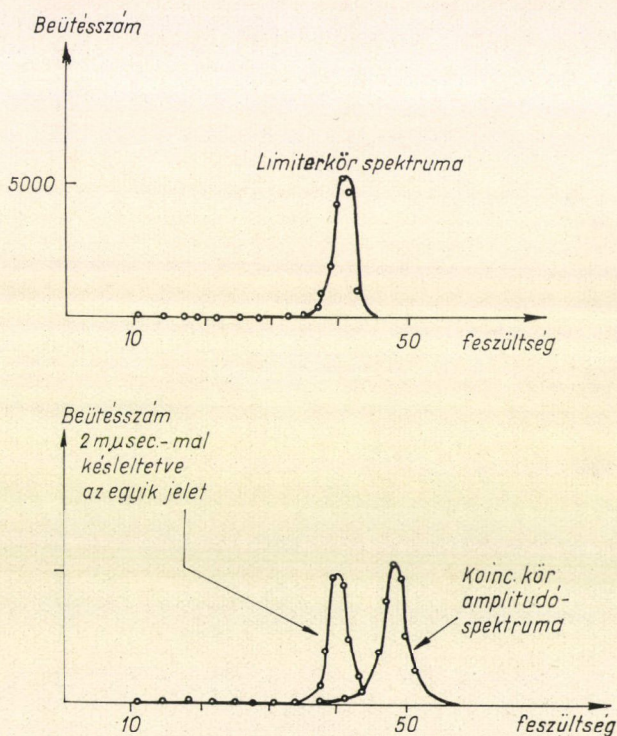


11. ábra. A rövidre zárt kábellel való formálás szemléltetése

- a) Idealizált jelhomlok a limiter bemenetén; b) az anódon megjelenő impulzus felfutása; c) kábellel formált jelek

A koincidencia-körben az impulzusok formálása rövidre zárt kábellel történik. Tegyük fel, hogy a limitercső rácsára a 11/a ábrán látható vezérlőjel érkezik. Jelöljük a cső anódköri időállandóját θ -val, az impulzusok felfutási idejét T -vel. Az anódban megjelenő jel felfutása a T/θ hányadosától függően a 11/b ábrán látható módon változik. Amíg $T \ll \theta$, a jelalak az anódon független T -től. Ha minden jel felfutási ideje sokkal kisebb, mint az anódköri időállandó, akkor a koincidencia-körre mindig egyforma jelek kerülnek. Ezért megfelelő diszkriminációval elvben tetszőlegesen kis felbontási időt kaphatunk, függetlenül a vágókábel hosszától. A valóságban rendszerint az impulzus felfutási ideje és az időállandó értéke össze-

vethető $T \sim \Theta$ és T értéke függ a Q össz-töltéstől. Ilyenkor a vágókábel hosszát nem szabad túl kicsire választani a felfutási időhöz képest, mert ekkor a különböző felfutású jelek átfedési ideje erősen változik és ez nagy koincidencia-veszteségre vezet. Ha azonban $\tau' \cong 3\Theta$ (τ' az impulzus oda- és visszafutási ideje a vágókábelben) és a diódák lezárásához szükséges szint nem túl magas, akkor mint a 11/c ábrán is látható, az egyszerre keletkező, de különböző T felfutású jelek t_2 átfedési ideje nem szór erősen. Így a koincidencia-jelek nagysága is közel egyforma lesz. Ugyanakkor teljesül még az is, hogy $V_{sz}(t_2)$ a $V_k(t_2)$ -től jól megkülönböztethető. A τ felbontóképesség és a számlálási veszteség tehát ebben az esetben nem függ lényegesen a vágókábel hosszától. Tehát pl. 1 μ sec felbontású koincidencia-berendezés létrehozásához olyan jeleknél, ahol a felfutási idő szórása is ezen érték körül van, nem 1 μ sec-os vágókábel szükséges, hanem ennek három-négyszerese.



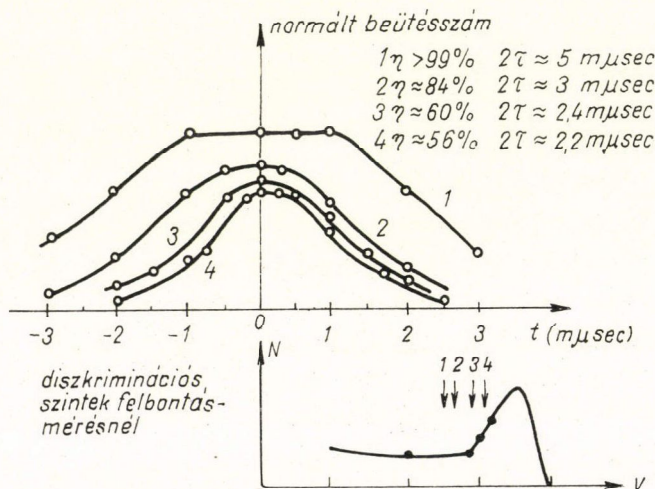
12. ábra. A limiterkör és a gyorskoincidencia-kör utáni impulzusok amplitúdóspektruma

A koincidenciakör vizsgálatánál RCA-6810-A elektronsokszorozót és plastik szcintillátort alkalmaztunk. Az elektronsokszorozó anódfeszültsége az utókisülés nélkül elérhető maximális feszültség ~ 2600 V volt. Az elektronsokszorozóról kijövő limitált jelek spektruma és a koincidenciakör amplitúdóspektruma, önkoincidencia esetén, vagyis ha mindkét bemenetre elágaztatással ugyanazt a jelet visszük, a 12. ábrán látható. Ugyancsak feltüntettük ezen az ábrán azt a koincidencia-spektru-

mot, amikor az egyik bemenetre jutó jeleket kábel segítségével 2 μsec -mal megkésleltettük. A lassú áramkörök alapján megállapítottuk, hogy még 25 keV energiájú elektronszintnél kisebb jelek is kivezérelték a formálást szolgáló D3a-csővet. A felbontás természetesen függött attól, hogy milyen nagyságtól kezdve számoltuk a koincidencia-jeleket.

A felbontóképességet ^{22}Na preparátummal és két kis méretű sztilbén kristállyal vizsgáltuk. A koincidenciakör amplitúdóspektruma kiszélesedett, a csúcson kívül nem esett le zérusra. Ennek az az oka, hogy amíg egy elektronsokszorozóról vizsgáltuk a berendezést, addig minden jel a mesterséges késleltetéstől függő t_2 ideig tartotta lezárva a diódákat, így a koincidenciakör kimenő jelei mindig egyforma amplitúdójúak voltak. Két elektronsokszorozóról hozva a jeleket a felfutási idők szórása miatt t_2 -ben és ezáltal $V_k(t_2)$ -ben is szórás lép fel, ami az amplitúdóspektrum eltorzulásához vezet.

A számlálási veszteséget gyors-lassú koincidencia elrendezésében mértük. A lassú ágak diszkriminációs szintjét úgy szabtuk meg, hogy biztosan átengedjék az 50 keV-nél nagyobb energiájú elektrontól származó jeleket. Az energiaskálát ^{22}Na és ^{137}Cs preparátumok csúcsainak helye alapján hitelesítettük. A lassú (10^{-6} felbontású) koincidencia-körrel először a két lassú ág koincidenciáit számoltuk. A hármas koincidenciákat a késleltetés függvényében vizsgáltuk, a zérus késleltetés-nél kapott hármas és kettes koincidenciák hányadosát tekintettük a gyorskoincidencia-kör hatásfokának. A kapott felbontási görbék a 13. ábrán láthatók.



13. ábra. Felbontási görbék különböző diszkriminációs szintek esetén

Bejelöltük, hogy az egyes felbontás-méréseknél milyen szint feletti koincidencia-jeleket engedtünk át, valamint feltüntettük a koincidencia hatásfokot is (η) $\cdot 2,2 \mu\text{sec}$ alá a felbontást még a hatásfok csökkenésével sem tudtuk leszorítani, ekkor már csak a koincidencia amplitúdóspektruma legvégében levő jeleket engedjük át, vagyis azokat, amelyek csaknem teljesen egy időben zárják le a diódákat. Az elektron-

sokszorozóban levő statisztikus szórás, valamint a limiter-fokozatoknak, a koincidenca-diódáknak és a koincidenckiakör utáni diszkriminátornak az indulási bizonytalansága miatt ezeknek a jeleknek is szór az amplitúdója, így ezen szórásen belül diszkriminálással a felbontás már nem javítható tovább. Ezeket a méréseket elvégeztük egy olyan vágó kábellel, amelyen a jeleknek a futási ideje (oda-vissza) 6 m μ sec volt és egy olyanal is, amelyen 2 m μ sec volt. A két mérés között szignifikáns különbséget (kivéve, hogy a rövidebb kábel esetén a kijövő jelek amplitúdója kisebb) — a várakozásnak megfelelően — nem tapasztaltunk. Az ábrákon a 6 m μ sec-os kábellel mért eredményeket ábrázoltuk.

A teljes repülési-idő-spektrum regisztrálását idő-amplitúdó-konverterrel és sokcsatornás amplitúdó-analizátorral végeztük. Az átfedési-idő rendszerű konverter működési elve ugyanaz, mint a fentebb leírt De Benedetti, Richings-féle koincidenckiaköré. A csöves változatban két rácsról vezérelhető 6BN6-ot alkalmaztunk, amely állandó árammal addig töltött egy kondenzátort, amíg mindkét rács vezérlést kapott. Ily módon a kijövő jel amplitúdója lineárisan arányos a két jel átfedési idejével és a repülési idő növekedésével csökken. Az átfedési elvnek az a sajátossága, hogy a kimeneten csak akkor kapunk kimenő jelet, ha mindkét oldalon van vezérlő impulzus. Megépítettük az átfedési-idő rendszerű konverter tranzisztorizált változatát is [Ko65].

9. §. Az időszórás csökkentése kompenzációval

Gyorsneutron-repülési-idő-spektrométerekben az időfelbontás legfontosabb összetevője abból származik, hogy a különböző amplitúdójú impulzusok különböző időpontokban érik el a rendszer indulási szintjét. A felbontásnak ez a tényezője különösen akkor fontos, ha nagy energiaintervallumban kívánjuk mérni a neutronok repülési-idő-spektrumát. A felbontás amplitúdófüggésének kiküszöbölésére több módszert is kidolgoztak [We56], [Ch60], [Gr59]. Azt használták fel, hogy a két-szer differenciált jel az amplitúdótól független időpontban halad át a zérus szinten. A zérusátmenet megállapításához szükséges áramkörök a nsec-os tartományban még nem állnak rendelkezésre. Mi kidolgoztunk egy egyszerű módszert [A64b], amelynek segítségével ez az időszórás erősen lecsökkenthető.

A repülési-idő-spektrumot idő-amplitúdó-konverterrel és sokcsatornás amplitúdó-analizátorral mérjük. Ahhoz, hogy kis energiájú neutronokat is jó hatásfokkal detektáljunk, az összes fotoelektron töltését be kell gyűjteni. Ilyenkor a formáló fokozat bemenetén az áramimpulzus integráljával arányos jelet kapunk. Az impulzus nagysága V arányos az össztöltéssel, azaz a meglökött proton E_p energiájával, felfutási ideje pedig gyakorlatilag a szcintillációs foszfor lecsengési idejének néhány-szorosa. A számítások egyszerűsítésére tételezzük fel, hogy az impulzusok felfutása lineáris és 20 nsec-ig tart. Ez a felfutási idő 1 kOhm munkaellenálláson a szokásos plasztikfoszforoknál reális érték. Ekkor a V maximális nagyságú impulzus $t = 20V_0/V$ nsec múlva éri el a konverter indításához szükséges V_0 szintet. A monoenergiás neutronok esetén a meglökött protonok energiaeloszlása és ebből kifolyólag V eloszlása $p(V)$ is közelítőleg egyenletes

$$p(V)dV = \frac{1}{V_m - V_0} dV$$

ahol V_m a maximális protonenergiához tartozó feszültségimpulzus és úgy normáltuk, hogy a konverter megszólalási valószínűsége 1 legyen. Ebben az esetben a neutronok időkéésésének eloszlása a következő:

$$p(t)dt = p(V)dV = \frac{1}{V_m - V_0} \left| \frac{dV}{dt} \right| dt = \frac{20V_0}{V_m - V_0} \frac{1}{t^2} dt \quad \left(20 \frac{V_0}{V_m} \leq t \leq 20 \right)$$

Az átlagos késési idő

$$\bar{t} = \frac{20V_0}{V_m - V_0} \ln V_m/V_0$$

V_m -en keresztül függni fog a neutronenergiától, így azt hibásan mérjük. Ha a mérendő minimális neutronenergiánál például $V_m = 3V_0$, úgy ez a hiba 11 nsec lesz és még $V_m = 10V_0$ -nál is 5 nsec. Mivel V_0 -t technikai okokból nem csökkenthetjük zérusra, ezt a korrekciót, kivéve, ha $V_m \gg V_0$, mindig figyelembe kell venni. Az időszórás:

$$\Delta t = \sqrt{\bar{t}^2 - (\bar{t})^2} = \sqrt{\left(\frac{V_0}{V_m} \right)^2 - \left(\frac{V_0}{V_m - V_0} \ln V_m/V_0 \right)^2}$$

$V_m = 3V_0$ -nál és $V_m = 10V_0$ -nál $\sim 3,5$ nsec és még $V_m = 50V_0$ -nál is 2,4 nsec.

Látható tehát, hogy különböző időszórások között ez a faktor dominál. Jobb a helyzet, ha az elektronsokszorozó olyan nagy jelet ad ki, hogy nem szükséges az egész áramimpulzust felhasználnunk, csak a felfutó ágát. Ekkor a jelek felfutási ideje 20 nsec helyett kb. 4 nsec lesz, ami azt jelenti, hogy az összes időbizonytalanság mintegy ötödrésztére csökken, azonban a monoenergiás neutronok amplitúdóspektrumának folytonos jellege miatt — főleg alacsonyabb energiákon — ez a detektálási határfokot igen erősen lerontja.

A V nagyságú impulzus a V_0 indulási szint miatt $t' = 20 \frac{V_0}{V}$ idővel később indítja a konvertert. Ezért $V' = A 20 \frac{V_0}{V}$ voltal kisebb jelet kapunk, mint amekkora megfelelne a neutron tényleges energiájának. (Ha a késeltetések úgy vannak megválasztva, hogy neutronjel érkezik meg előbb a konverter bemenetére, akkor ugyanennyivel nagyobb jelet kapunk. Ha a neutrontektor V nagyságú jeléből képzett $U' = A 20 \frac{V_0}{V}$ feszültséget analízálás előtt hozzáadjuk a konverter eredeti kimenő jeléhez, és az így kapott $U'' = U + U'$ feszültségéből állapítjuk meg a neutron energiáját, úgy ezt a fajta időbizonytalanságot kiküszöböltük.

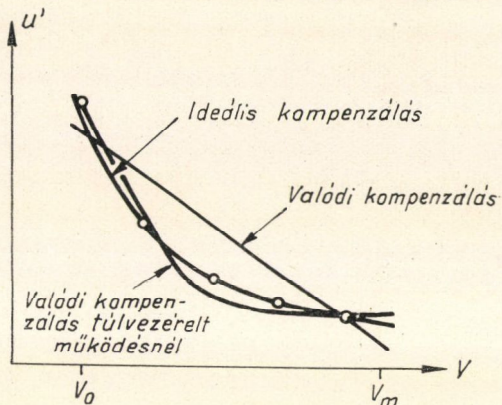
A gyakorlati megvalósításnál nem szükséges a kompenzálást pontosan ezen képlet szerint elvégezni, hiszen ez az impulzusok lineáris felfutásán alapszik, ami csak közelítés. A korrekció lényege olyan, hogy nagy amplitúdójú jelhez kis, kicsihez nagy korrekciót kell adnunk. Ezt elérhetjük úgy is, hogy a konverter kimenő jeléhez hozzáadunk egy fix értéket és ebből kivonunk egy az elektronsokszorozó jelével arányos mennyiséget. A tényleges repülési időt tehát a következő feszültségekből állapítjuk meg:

$$U'' = U + a - bV.$$

A fix amplitúdót valójában hozzá sem kell adnunk a konverter jeléhez, mert ez csak a zérus időpont eltolódását jelenti, amit mérésrel egyszerűen megállapíthatunk,

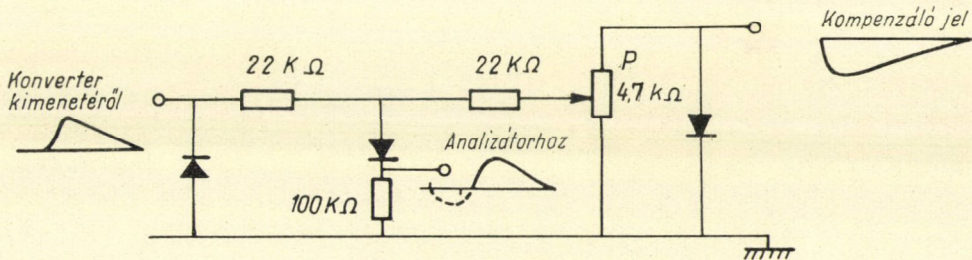
a kivonást pedig egy ellenálláson elvégezhetjük. A 14. ábrán feltüntettük a lineáris felfutás közelítésével számított „ideális” és a gyakorlatban igen egyszerűen megvalósítható kompenzáló jel nagyságát. Az ideális kompenzálást jobban megközelítjük, ha az elektronsokszorozót olyan beállításban használjuk, hogy a nagy jelek már túlvezéreljék. Ez az időkésést nem befolyásolja, mivel a V_0 szint eléréséhez szükséges néhány fotoelektronra még lineáris a cső, de egy bizonyos szint elérése után már egyforma jeleket kapunk. Ezeknek a nagy jeleknek az időszórása viszonylag kicsi, ezért a konverternek az ilyenekből származó kimenő jeleihez ugyanazt a korrekciót adjuk.

A felfutási idő szórását kompenzáló jelet az elektronsokszorozó anódjáról vettük le, majd nyújtás és erősítés után kivontuk a konverter jeleiből. A kompenzálójel nagyságát potencióméterrel lehetett változtatni. A diódák a nem kívánatos polaritású jelfarkokat vágták le, illetve a szinteket rögzítették (15. ábra).



14. ábra. A kompenzálás szemléltetése

Kapuzással gondoskodtunk arról, hogy a neutrondetektor igen kis jeleiből származó koincidenenciák ne kerülhessenek az analízátorra. A lassú áramkörökkel való kapuzás célja általában az, hogy a kis zajjelekből származó véletlen koincidenenciákat letiltsa. Esetünkben a zajjeleket közvetlen az elektronsokszorozó kimenetén

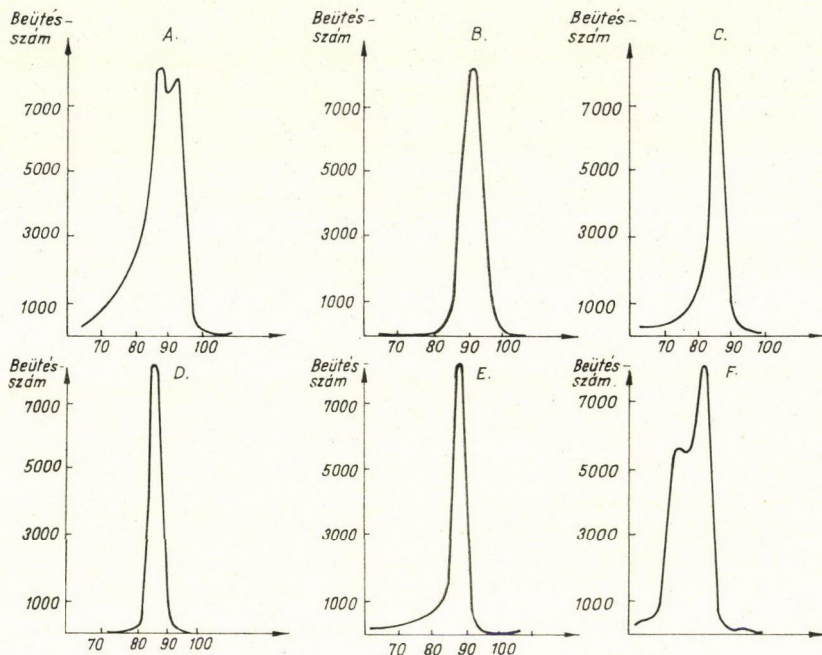


15. ábra. A kompenzáló kör kapcsolási rajza

levágtuk, így a kapuzás más célt szolgált. A meglökött protonok folytonos energiaeloszlása miatt mindig lesznek olyan jelek, amelyek már elindítják a berendezést, de nem tartanak 100 nsec ideig. Ezek nyilván rövidebb ideig fedhetik át egymást, így nagyobb repülési időhöz, hamis energiához rendeljük őket. A neutrondetektor lassú kapuzó áramkörét valamivel magasabb indulási szintre állítottuk, mint a gyors ágat, úgy, hogy azokat a jeleket, amelyek 100 nsec-nál rövidebbek voltak, letiltsuk. A kapuzás önmagában is csökkenti a felbontási időt, kompenzálásnál azonban azonos hatásfokra lényegesen jobb felbontást kapunk. A kapuzás szintje 3 MeV-es

neutronok energiaspektruma alapján 100 keV protonenergiánál biztosan alacsonyabb volt.

Meggyőződünk arról, hogy a kompenzálás nem rontotta el az idő-amplitúdó-átalakítás linearitását. Ezután különböző nagyságú kompenzáló jelekkel felvettük a (d, t) reakcióból származó 14,7 MeV-es monoenergiás neutronok repülési idő-spektrumát. Ezeket a 16. ábrán tüntettük fel. Jól látható, hogy kompenzálás és



A. $2\tau = 11$ csat.
kompenzálás és kapuzás nélkül

B. $2\tau = 8$ csat.
kompenzálás nélkül kapuzva

C. $2\tau = 5$ csat.
optimális kompenzálás
kapuzás nélkül

D. $2\tau = 4,7$ csat.
optimális kompenzálás kapuzva

$2\tau = 3,5$ csat.

E. alacsonyabb elektronokszorozó
feszültségnél optimális kompenzálás, kapuzás nincs

$2\tau = 12,5$ csat.

F. alacsonyabb anódfeszültség-nél túlkompenzálva

16. ábra. 14 MeV energiájú neutronok repülési-idő görbéi kompenzációval

kapuzás nélkül a kis fényhozamú szénjelek a lassú felfutás miatt még egy csúcsot hoznak létre. A kapuzással ezt a hatásfok csökkentése árán el lehet tüntetni, míg kompenzációval nemcsak eltűnik ez a csúcs, hanem jóval keskenyebb is lesz a monoenergiás neutronok repülési-idő-spektruma, míg a hatásfok változatlanul marad. Túl nagy kompenzáló jeleknél ismét kiszélesedik a görbe.

Ezzel a módszerrel elértük, hogy az idő-amplitúdó-konverterben monoenergiás neutronok időspektrumának szélessége 8 nsec-ról 3,6 nsec-ra csökkent. Az alfa-detektorral való összehasonlítás alapján ekkor a neutron-detektor hatásfoka 14,7 MeV-es neutronokra 0,22 volt. Alacsonyabb anódfeszültségnél (valamivel kisebb, $\sim 0,17$ hatásfoknál), ami megfelel ~ 2 MeV-es protonenergia-küszöbnek, amikor a szcintillátorban meglökött szénatomoktól származó jelek nem indíthatták meg a konvertert, ugyanilyen módszerrel 6 nsec-ról, 2,2 nsec-ra javult a felbontás. Tovább ezzel a módszerrel a felbontást már nem lehetett javítani, mivel ekkor már egyéb tényezők, például a detektor nagy mérete szabta meg az időszórást. Az ismertett eljárás alkalmas arra, hogy a jelamplitúdó-változásból adódó időszórást idő-amplitúdó-konvertereknél és gyors-koincidencia-berendezéseknél is az egyéb időszórások nagyságrendjébe csökkentsé.

Vizsgálatokat végeztünk a kompenzációval kapcsolatban sok neutrontetektor egyidejű alkalmazása esetén [A68]. A 11. §-ban leírt sokdetektoros mérőrendszer tárolóeleme egy TPA típusú számológép, így a kompenzálást áramkörök helyett programozással lehet megoldani.

A feladat a konverter által szolgáltatott amplitúdónak (U) korrigálása a detektorok hozzátartozó analóg ági amplitúdója (V_a) alapján. A korrigált amplitúdó:

$$U' = U + \Delta U(V_a, V_0),$$

ahol $U = A\Delta t$, az A állandó az idő-amplitúdó konverziós tényező, V_0 a küszöbszint. A fent leírt kompenzációnál a

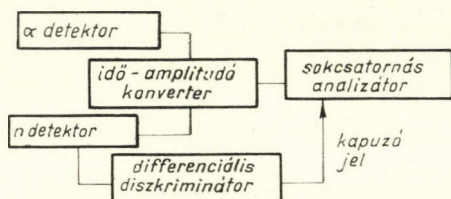
$$\Delta U(V_a, V_0) = A20 \frac{V_0}{V}$$

lineáris közelítést alkalmaztuk. A közelítésen kívül egyszerűsítő feltevéseket is alkalmaztunk: lineáris jelfelfutás és téglalap alakú amplitúdóspektrum.

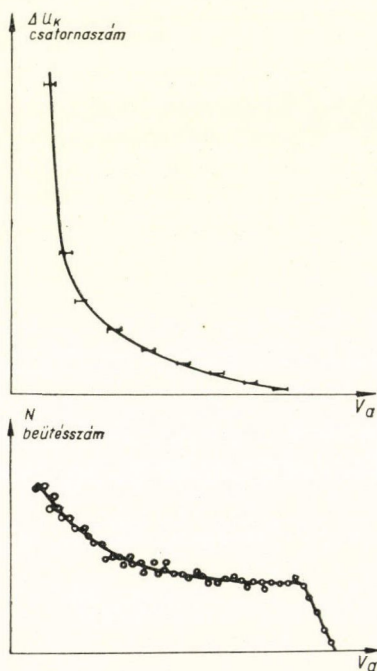
A $\Delta U(V_a, V_0)$ függvényt a 14 MeV energiájú neutronok repülési időcsúcsának analízise alapján lehet meghatározni. Ha a pasztik szcintillátorban meglökött protonok amplitúdóspektrumából csak keskeny intervallumot veszünk figyelembe, akkor a különböző jelfelfutásból eredő időszórás elhanyagolható az egyéb okokból, például fotonszám, a fénybegyűjtés, a fotoelektronszám és az elektronsokszorozók statisztikus ingadozásából eredő időszórás mellett. A megfelelő intervallum-szélesség kiválasztható úgy, hogy addig felezzük az intervallumot, míg két egymás utáni felezés hatására a repülési csúcs félérték-szélessége nem változik. Ez a szűk tartomány különböző szélességű lesz a teljes amplitúdóspektrum különböző részein. Nyilvánvaló, hogy kis jelamplitúdónál szűkebb tartományt kell kiválasztani, mivel a jelek egymáshoz viszonyított időkéseése relatíve nagyobb. Az eljárás tehát a következő: betárolunk bizonyos számú (U, V_a) adatpárt, amit 14 MeV energiájú neutronokkal nyertünk. Az előzetesen betárolt program szerint meghatározzuk a megfelelően szűk ΔV_a tartományokba eső adatoknak repülési idejét, illetve ezek eltérését a maximális protonenergiához tartozó repülési csúcstól. Az eltérések adják a $\Delta U(V_a, V_0)$ függvényt. A továbbiakban az így meghatározott függvény segítségével rendre minden feldolgozásra kerülő eseménynél végrehajtjuk a kompenzálást.

Ezen kompenzációs elvet a 17. ábrán elektronikus összeállítással próbáltuk ki. A meglökött protonok amplitúdó-eloszlását differenciális diszkriminátorral szűk csatornákra bontottuk és vizsgáltuk az ezen csatornákhöz tartozó időeloszlás-görbé-

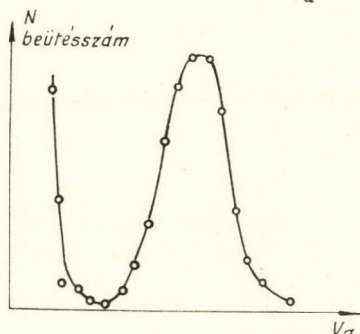
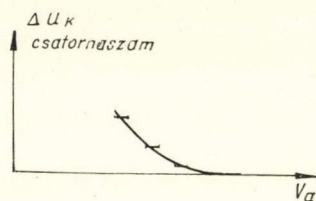
ket. A differenciál-diszkriminátor kimenő impulzusairól kapztuk az analizátort. Az analizátorral meghatároztuk a csúcsok helyét és a maximális amplitúdóhoz tartozó csúcstól való távolságát. Az így leolvasott távolságok közvetlenül $\Delta U(V_a, V_0)$ értékét adják meg (18. ábra). Az alfa-jelek amplitúdó-eloszlása szerinti korrekciót is elvégeztük (19. ábra). Ez esetben értelemszerűen az alfa-detektor energiaarányos impulzusai kerültek a differenciális diszkriminátor bemenetére. $\tau = 2,95$ nsec szélességű kompenzálatlan repülési csúcs (20. ábra), szélessége csak neutronoldali kom-



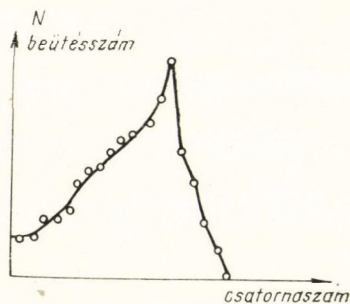
17. ábra. A $\Delta U(V_a, V_0)$ mérésére szolgáló elektronikus összeállítás egyszerűsített blokkvázlata



18. ábra. A $\Delta U(V_a, V_0)$ neutronjelekre (felső ábra) és a hozzá tartozó amplitúdó-spektrum (alsó ábra)



19. ábra. A $\Delta U(V_a, V_0)$ függvény α -jelekre (felső ábra) és a hozzá tartozó amplitúdóspektrum (alsó ábra)



20. ábra. Kompenzálatlan repülési csúcs $2\tau = 2,95$ nsec

penzálás eredményeképpen $\tau = 1,18$ nsec-ra csökkent, míg neutron- és alfaoldali kompenzálás hatására $\tau = 1,03$ nsec-ra (21. ábra). A $\tau = 2,95$ nsec szélességű kompenzálatlan csúcsot elektronikus kompenzációval csak $\tau = 1,8$ nsec-ra tudtuk csökkenteni.

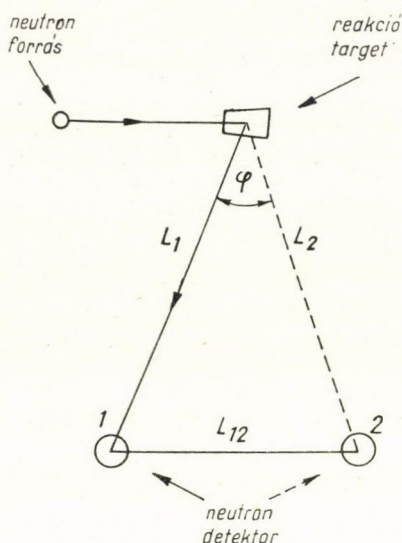


21. ábra. Kompenzált repülési csúcs. Szaggatott vonal: csak neutronoldali kompenzálás ($2\tau = 1,18$ nsec), folytonos vonal: n és α oldali kompenzálás ($2\tau = 1,03$ nsec)

10. §. Detektorok közötti „átszórás” kiküszöbölése

10–20 MeV-es neutronokkal bombázva közepes és nehéz atommagokat, legnagyobb valószínűséggel $(n, 2n)$ reakció jön létre. Ebben az igen gyakori reakcióban a kilépő két neutron közötti energia- és szögkorrelációkról csak nagyon keveset tudunk. A pontos méréseket megnehezíti, sőt bizonyos esetekben lehetetlenné teszi az, hogy mindkét detektor megszólalhat ugyanarra a neutronra. Ezt a jelenséget a továbbiakban átszórásnak, az ebből származó koincidenenciákat, amelyeket így tévesen $(n, 2n)$ eseménynek regisztrálunk, átszórási koincidenenciáknak fogjuk nevezni, mivel úgy jönnek létre, hogy a neutron bejut az egyik detektorba, itt energiáját egy vagy több ütközéssel részben leadja, majd átszóródik a másik detektorba és azt is megszólaltatja. Az alábbiakban ismertetünk egy elvet és ennek egy gyakorlati megvalósítását, amellyel az átszórási koincidenenciákat a repülési-idő-módszernél ki tudjuk küszöbölni, míg a tényleges $(n, 2n)$ eseményekből származó koincidenenciák regisztrálásának valószínűsége (a neutronok energiájától és a két detektor kölcsönös helyzetétől függően) nem csökken lényegesen [A65].

Átszórás esetén az egyik detektorba érkező neutron energiája E_1 , a szcintillációs detektorban leadott energia E_1^p , az átszóró neutron energiája $E_{1,2} = E_1 - E_1^p$ (22. ábra). E_1 -et és $E_{1,2}$ -t a startjelhez viszonyított repülési idők, E_1^p -t pedig a detektorjel amplitúdója alapján állapítjuk meg. Az olyan eseményeket, amelyeknél az átszóró neutronok energiájának és az első detektorban leadott energiájának az összege



22. ábra. Szögkorrelációs mérési elrendezés. Az 1., ill. 2. detektorba érkező neutron energiája E_1 , ill. E_2 , a leadott energia E_1^p , ill. E_2^p . Az 1-ből 2-be való átszórás esetén az átszóró neutron energiája $E_{1,2}: 0,72 E_1 - E_1^p \leq E_{1,2} \leq E_1 - E_1^p$

megegyezik a bejövő neutronok energiájával

$$E_1 = E_1^p + E_{1,2}$$

letiltjuk.

A letiltandó energia meghatározása a gyakorlatban a következőképpen történik: ha t_1 és t_2 a neutronnak a startjeltől mért repülési ideje nsec-ban, akkor energiája MeV-ben $E_1 = \frac{72,3L_1}{t_1^2}$, $E_2 = \frac{72,3L_2}{t_2^2}$, ahol L_1 és L_2 a detektoroknak a targettől való távolsága m-ben. Az átszóródott neutron a két detektor közötti $L_{1,2}$ távolságot $t_2 - t_1$ idő alatt teszi meg, így a repülési időkből meghatározott energiája $E_{1,2} = \frac{72,3L_{1,2}}{(t_2 - t_1)^2}$. Proton visszalökés gyorsneutron-detektorokban az elektromos impulzus nagysága közelítően arányos a meglökött proton E_1^p energiájával, így az első detektorban a V_1 jel amplitúdója $E_1^p \approx aV_1$. Ha az átszórás egyszeres ütközéssel következik be, akkor $E_1^p + E_{1,2} = E_1$. Az összes olyan koincidenenciákat tehát, amelyeknél teljesül ez a feltétel, letiltjuk.

Szögkorrelációs méréseknél a detektorok szokásos elrendezése olyan, hogy átszórás az $n-p$ szórás előirányulása miatt csak kétszeres ütközéssel következhet be. A két ütközésből az egyik hidrogénen, a másik pedig szénen történik, mivel ha két szénatomon ütközött a neutron, akkor az ezek által együttesen létrehozott fényimpulzus a kisebb energia és a rosszabb energia-fényátvártási tényező miatt a küszöbérzékenység alatt van, míg a két hidrogénatomon való és a hidrogén kisebb makroszkopikus hatáskeresztmetszete miatt ritkábban bekövetkező ütközés után, bár lehetséges már az átszórás, azonban ennek valószínűsége még igen kicsi, mivel az átlagos szórási szög 48° . Az E_1 energiájú neutronok maximális energiavesztése szénen $0,28 E_1$, így átszórás esetén a következő egyenlőtlenség érvényes:

$$E_1 - 0,28E_1 \leq E_1^p + E_{1,2} \leq E_1$$

Ekkor tehát azokat a koincidenenciákat kell letiltanunk, amelyekre ez a feltétel teljesül. Ezáltal természetesen valódi $(n, 2n)$ koincidenenciákat is veszítünk.

Az átszórási koincidenenciák letiltására épített berendezés blokksémája a 23. ábrán látható.

A repülési idő négyzetének reciprokát, azaz a neutronenergiával arányos jelet előállító egység a következőképpen működött:

A konverterből kijövő 100 mμsec felfutású τ időállandójú RC körrel formált U amplitúdójú jel rákerül egy Schmitt-körre. A Schmitt-kör kimenő jelének időtartama

$$t_{ki} = \tau \log \frac{U}{U_0}$$

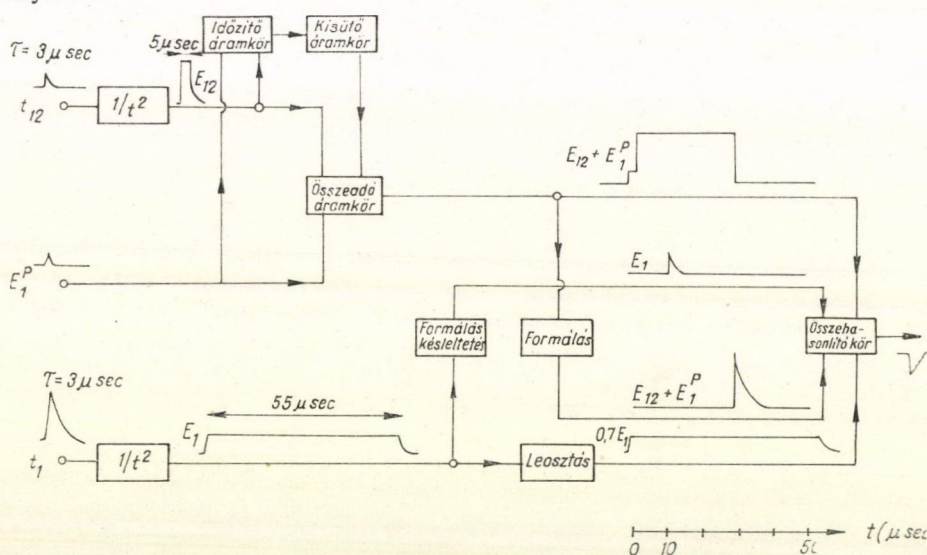
ahol U_0 a kör billenési szintje. A Schmitt-kör indulásakor egy τ' időállandójú $\tau' U_1$ feszültségre töltött RC kör elkezd kisülni. Visszabillenéskor a Schmitt-kör a kisülést leállítja és a kondenzátoron maradt

$$U_c(t) = U_E = U_1 e^{-kt/\tau'} = U_1 \left(\frac{U_0}{U_1} \right)^{\tau/\tau'}$$

feszültséget a kimenetre kapcsolja. $\tau/\tau' = 2$ esetén

$$U_E = U_1 \frac{U_0^2}{U_1^2} = \frac{\text{const}}{U^2} = \text{const } E$$

A 24. ábra az $1/U_i^2$ áramkör kimenő feszültségét mutatja a bemenő feszültség függvényében.



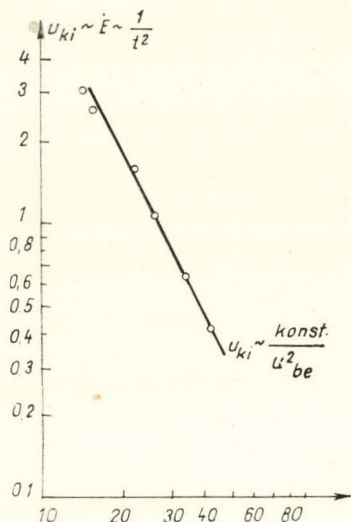
23. ábra. Az átszórás letiltó elektronika blokkdiagramja

Az átszórás letiltó elektronika működési elve a következő: az átszórt neutron és a meglökött proton energiájával arányos jeleket megnyújtottuk és összeadtuk. Az összegzett jel időtartamát egy változtatható billenési idejű monostabil multivibrátor szabja meg, mely billen, ha a két bemenet bármelyikére a zajszintnél nagyobb jel érkezik. Visszabillenéskor megindítja a kisütő kört, mely az összeadó kör két kondenzátorát ismét földpotenciálra helyezi. Az energiával arányos feszültségek összehasonlítása két közös anód-munkaellenállásra dolgozó, nyugalmi helyzetben lezárt triódával történik. Az egyik cső rácsára rávittük az $E_1^P + E_{1,2}$, katódjába pedig az E_1 , a másik cső rácsára a $0,72 E_1$, katódjára pedig az $E_1^P + E_{1,2}$ energiával arányos feszültségeket. A közös anódban csak akkor kapunk jelet, ha az $E_1^P + E_{1,2} > E$ vagy $0,72 E_1 > E_1^P + E_{1,2}$ feltételek valamelyike teljesül. Így ha a koincidenenciák átszórásból származhatnak, nincsen kimenő jelünk, különben van. A jeleket úgy formáltuk és késleltettük, hogy a rácsokban csak akkor lehetett vezérlés,

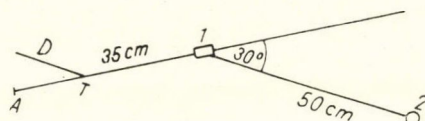
amikor a katódban a teljes vezérlőjel kialakult. Ez a berendezés csak az 1-es detektorból való átszórást tiltja le, 2-esből való átszórás letiltásához egy ugyanilyen berendezés szükséges.

A készüléket 14 MeV-es neutronok egyszeres ütközéssel való átszórásával ellenőriztük. A geometriai elrendezés a 25. ábrán látható.

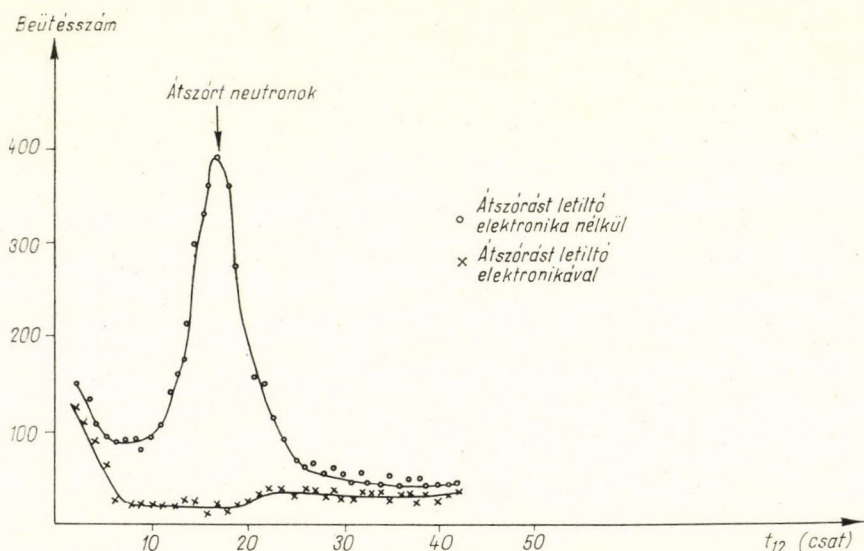
Az $E_1 = 14,7$ MeV neutronenergiát az alfa-detektor és az 1-es neutrondetektor (10×30 mm-es sztilbén kristály és RCA 6810/A elektronsokszorozó), az átszóró neutron energiáját $E_{1,2} = E_1 \cos^2 \theta$ -t a két neutrondetektor közé elhelyezett idő-



24. ábra. Az $1/U_c^2$ áramkör bemenő feszültség — kimenő feszültség görbéje



25. ábra. A D 200 keV energiájú deuteron nyáláb a T trícium targetben neutronokat kelt. A 14,7 MeV energiájú neutronokat az 1 szcintillációs detektor (30×10 mm-es sztilbén kristály), a velük egy időben keletkezett visszalökött α -kat az A szcintillációs detektor detektálja. Az átszóró neutronokat a 2 szcintillációs detektorral (50×100 mm-es plasztik foszfor) regisztráltuk



26. ábra. Hidrogénről egyszeresen szóró neutronok repülési-idő-spektruma az átszóróást letiltó elektronikával, illetve nélkül

amplitúdó-konverterrel mértük. Az 1-es detektor energiamérésre szolgáló ágában felvettük a meglökött protonok amplitúdóspektrumát, az átszóró neutronokat mérő konverter jelével kapuzva. Így csak azokat a protonokat detektáltuk, melyeknek energiája $E_1' = E_1 \sin^2 \theta$. Az ehhez tartozó jel nagyságához állítottuk be a repülési-módszerrel mért energiákat is. Ezután megmértük az átszóró neutronok repülési-idő spektrumát az átszórást letiltó elektronikával, illetve nélküle. A két spektrum (azonos intenzitásnál és azonos monitorral) a 26. ábrán látható.

Az egyenletes eloszlású véletlen koincidenenciákból jól kiemelkedik az átszóró neutronok csoportja. Az átszórást letiltó elektronikával ez teljesen eltűnik, de a véletlen koincidenenciák száma is kevesebb lesz valamivel, mert ekkor lecsökken az egész $(n, 2n)$ berendezés hatásfoka. Utána a 2-es detektort úgy helyeztük el, hogy a két neutrondetektor között egyszeres ütközéssel való átszórásból ne lehessen koincidenencia. Ekkor igen nagy neutron-intenzitással dolgoztunk, hogy a többszörös szórásból származó átszórási koincidenenciákat elhanyagolhassuk a véletlen koincidenenciák mellett. Az átszórást letiltó elektronika nélkül a véletlen koincidenenciák időbeli eloszlása teljesen egyenletes volt. A letiltás bekapcsolása után a spektrum alakja a 27. ábrán látható módon változott meg. Ugyanezen az ábrán feltüntetjük, hogy ha a monoenergiás neutronok amplitúdóspektruma téglalap alakú, akkor számítás alapján milyen lesz a véletlen koincidenenciák időbeli eloszlása.

Az átszórást letiltó elektronika nemcsak az átszórási eseményeket tiltja ki, hanem a valódi $(n, 2n)$ események egy részét is. Ez azt jelenti, hogy a hatásfokunk lecsökken a letiltás valószínűségével. A csökkenés mértéke függ a neutronok E_1 , E_2 energiájától és a detektorok elrendezésétől. Szimmetrikus detektor-elrendezésnél $L_1 = L_2 = L_{1,2} (2 \sin \varphi/2)$ az átszórást letiltó elektronika

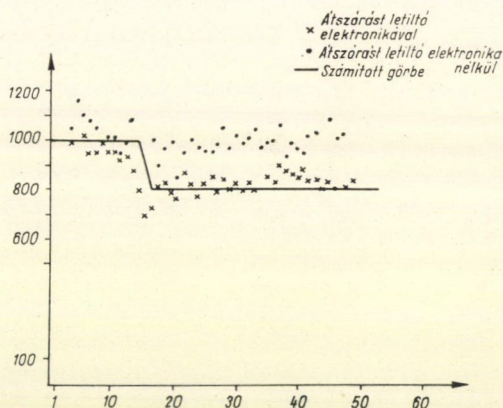
$$E_{1,2} = \frac{4E_1 E_2}{E_1 + E_2 - 2\sqrt{E_1 E_2}} \sin^2 \varphi/2$$

energiájú „átszóró” neutronot regisztrál, így azokat a valódi eseményeket is letiltjuk, melyeknél az i -k ($i=1, 2$) detektorban leadott E_i' energia

$$0,72E - \frac{4E_1 E_2}{E_1 + E_2 - 2\sqrt{E_1 E_2}} \sin^2 \varphi/2 \leq E' \leq E - \frac{4E_1 E_2}{E_1 + E_2 - 2\sqrt{E_1 E_2}} \sin^2 \varphi/2$$

értékek között van.

A meglökött protonok amplitúdóspektrumának ismeretében ennek valószínűsége kiszámítható, mivel azonban ez csak korrekció, a hatásfok-változás nem függ erősen a tényleges amplitúdóspektrum alakjától.



27. ábra. Véletlen koincidenenciák időbeli eloszlása átszóródást letiltó elektronikával, illetve nélküle. A folytonos vonal számított görbe, melynél a meglökött protonra téglalap alakú spektrumot tételeztünk fel

A 11. §-ban leírt sokdetektoros mérőrendszernek az $(n, 2n)$ magreakció szög- és energiakorrelációjának vizsgálatára való alkalmazásánál ilyen átszórást letiltó berendezésekre nincs szükség ilyen átszórást letiltó áramkörök beépítésére. Az ismertetett elv alapján annak vizsgálatát, hogy két neutrondetektor koincidenenciája eleget tesz-e a fenti feltételnek, egyszerű programmal meg lehet oldani. Az átszórás feltételeit kielégítő eseményeket figyelmen kívül hagyva, valódi koincidenenciákat is elvesztünk. Erre vonatkozólag számítással lehet korrekciót végezni. A korrekció kísérleti ellenőrzésére két út kínálkozik: 1. különböző monoenergiás neutronokkal mérni az átszórási koincidenencia-eloszlást a szög függvényében; 2. 14 MeV energiájú neutronokkal koincidenencia-kísérletet végezni olyan szórótargeten, ahol az $(n, 2n)$ küszöb magasban van, pl.: ^{12}C , ^{56}Mo , ^{32}S .

11. §. Sokdetektoros mérőrendszer

Gyors neutronokkal végezhető kísérletek körét a regisztrálási idő determinálja. Sokszor alakul ki az a helyzet, hogy le kell mondani valamely kísérlet elvégzéséről, bár az mint probléma érdekes lenne, de a szükséges regisztrálási idő túl hosszú.

A repülési-idő-módszernél a jó energia- és szögfelbontás biztosítása érdekében a detektorokat a neutronforrástól távol kell elhelyezni, ami kis detektor-térszöget eredményez. A kis térszögek következtében, ha a gyorsító maximális intenzitását és a nagy terhelésű egységek maximális terhelhetőségét figyelembe vesszük, a regisztrálható események időegységenkénti száma (n, n') típusú magreakciók vizsgálatánál is meglehetősen alacsony lesz. Még inkább ez a helyzet az $(n, 2n)$ vagy $(n, n'\gamma)$ magreakciók vizsgálatánál. A két reakciótermék koincidenenciáinak száma a megfelelő térszögek és határfokok szorzatától függ. Statisztikailag kiértékelhető számú mérési adat összegyűjtése már a két detektor egyetlen szöghelyzeténél is nagyon hosszú ideig tart. Az összes szögekombinációban való mérés olyan hosszú meghibásodásmentes üzemidőt igényel mind a gyorsítóberendezés, mind a regisztráló berendezés részéről, ami általában az ilyen célkitűzést irreálissá teszi. A kínáló megoldás, hogy egyszerre több, különböző szögben elhelyezett detektorral minden szögekombinációt egyidejűleg mérjünk. Ily módon n detektor esetében (n, n') szögeloszlás mérésénél a regisztrálási idő n -szer, $(n, 2n)$ koincidenencia-vizsgálatoknál $\frac{n(n-1)}{2}$ -szer rövidül meg.

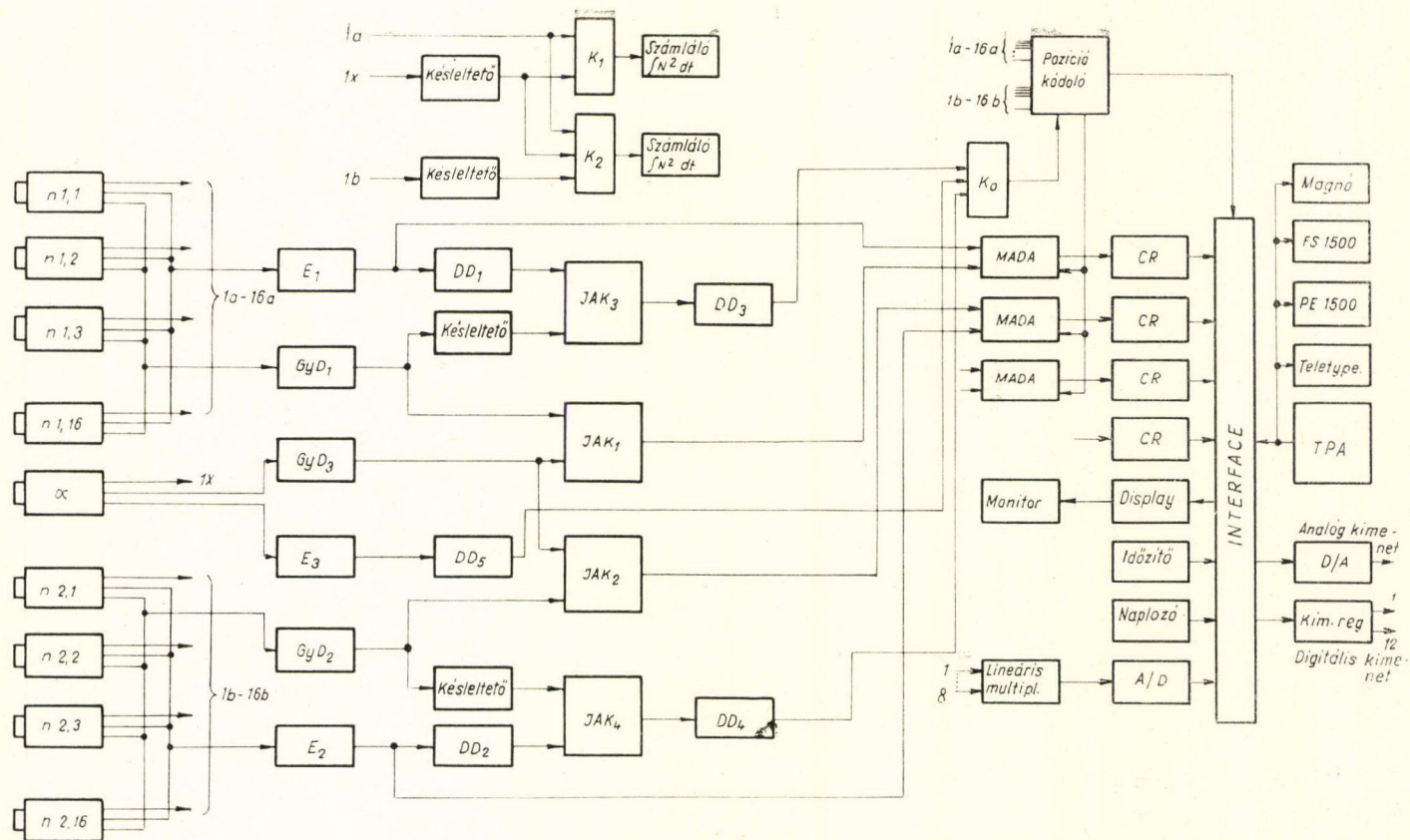
Sok detektor alkalmazásánál a konvencionális regisztrálási eljárás — gyors-lassú koincidenencia-berendezések + sokcsatornás amplitúdó-analizátorok — gazdaságilag és kezelhetőség szempontjából egyaránt súlyos, áthidalhatatlannak tűnő nehézségeket vet fel. Hasonló problémák a töltött részecskékkel végzett kísérletekben, valamint a gamma-spektroszkópia területén is jelentkeztek. A jobb felbontású félvezető detektorok állandóan fokozták az analizátorok csatornaszámával kapcsolatos igényeket. Emiatt azonban az adatok feldolgozása és kezelése, csúcsok kikeresése, csúcs alatti területek meghatározása stb. mind nehezebb lett. Fejlődést jelentett az, hogy a papírszalagra perforált, vagy mágnesszalagra rögzített adatok további feldolgozását számológéppel lehet elvégezni. A nagy, központilag elhelyezett számológépek használata azonban csak részben oldotta meg a nehézségeket, az új probléma elsősorban a számológéphez való járkálással kapcsolatban, a mérési eredmények körülményes, elhúzódo realizálásában jelentkezett.

Az utóbbi években egy újfajta megoldás útja nyílt meg, a kis méretű, viszonylag olcsó számológépek megjelenésével. Ez megteremtette a számológépek on-line alkalmazásának lehetőségét az amplitúdó-analizálás és az adatredukció területén. Ilyen típusú elrendezések kiépítése rohamos fejlődésnek indult. A számológép ilyen felhasználása jelentősen megnöveli a regisztráló rendszer flexibilitását, lehetővé teszi a mérés sokoldalú vezérlését. Sok detektor és számológéppel működő on-line rendszer esetén a regisztrálási idő nemcsak azáltal rövidül meg, hogy sok mérést végzünk egyidejűleg, hanem a meghibásodás viszonylagos gyakoriságának csökkenése miatt az időkihasználás is megjavul. Egyrészt rövidebb ideig működik a gyorsító, másrészt valójában kisebb regisztráló berendezést kell üzemben tartani. Egydetektoros berendezésnél számos funkciót áramkörrel hajtunk végre, pl. alsó-felső szint kapuzást, kompenzálást, alakdiszkriminálást és $(n, 2n)$ koincidenciák mérésénél az átszórási események letiltását. Ezen áramkörök feleslegessé válnak azáltal, hogy a mérés vezérlését és a tárolást számológéppel oldjuk meg. Mindazokat az áramköröket, amelyek logikai funkciókat hajtának végre, elhagyhatjuk és megfelelő programok segítségével a számológéppel valósítjuk meg. Egy huzalozott vezérlő + egy 4096 szavas tároló, valamint egy 4096 címes számológép között minimális árkülönbség van. A számológép mellett szól a közbelső adatfeldolgozás lehetősége mellett az, hogy az egész mérőberendezést, beleértve a gyorsítóberendezést is, mérés közben folyamatosan ellenőrizni lehet. (Pl. gyorsító stabilizálás.) Ezek alapján mérőberendezésünk terveit a KFKI-ban kidolgozott TPA számológéphez illesztettük és kiegészítettük a gyorsítóberendezés egyes paramétereinek ellenőrzéséhez, valamint a véletlen események korrekciójának kiszámításához szükséges egységekkel.

A sokdetektoros mérőrendszer blokkvázlata a 28. ábrán látható. A berendezés egyaránt alkalmas rugalmas és rugalmatlan neutronszórási szögeloszlásának mérésére, (n, n') , valamint $(n, 2n)$ koincidenciák szögeloszlásának regisztrálására. Annak érdekében, hogy az $(n, 2n)$ mérésnél az összes lehetséges szöghalkombinációt egyszerre mérhessük anélkül, hogy egy bonyolult kapurendszert kellene a detektorok és a konverterek közé iktatni, minden szöghelyzetben két detektort helyezünk el és ezeket „vagy” áramkörökön keresztül két csoportba összekötve visszük a további áramkörökbe. Az $n_{1,1} - n_{1,16}$ jelű neutrontetektorok képezik az egyik, az $n_{2,1} - n_{2,16}$ jelűek a másik detektorcsoportot. A mérőrendszer tehát 32 detektort tartalmazhat. Az azonos csoportba tartozó detektorok anódjai az ábra sematikus jelölésétől eltérően összeadó kapukon keresztül vannak összekötve. Az impulzusok formálása a GyD_1 , GyD_2 gyors diszkriminátorokkal történik.

14 MeV-es neutronokkal végzett kísérletekben a kezdeti időpont kijelölésére a visszalökött alfa-részecskék szolgálnak. Az alfa-detektor anódjáról levett jelet szintén egy gyors diszkriminátor formálja: GyD_3 . A berendezés természetesen más startjelekkel is működtethető, ha azokat visszük a gyors diszkriminátor bemenetére.

A két neutrontetektor-csoport gyors diszkriminátorainak kimenő impulzusai, valamint az alfa-detektorhoz tartozó gyors diszkriminátor elágaztatott impulzusa a neutronok repülési idejét mérő IAK_1 , IAK_2 idő-amplitúdó konvertert működteti. Ezek a neutron repülési idejével arányos kimenőjelet adnak, amely analóg digitál konverterbe megy és az amplitúdónak megfelelő sorozat címregiszterben tárolódik. A maximális amplitúdó-bontás 8 bit, azaz 256 csatorna. A két neutronágban az analóg digitál konverziót egy-egy mátrix analóg-digitál konverter (MADA) valósítja meg, amelynél a maximális amplitúdó-bontás két koincidenciában levő bemenő

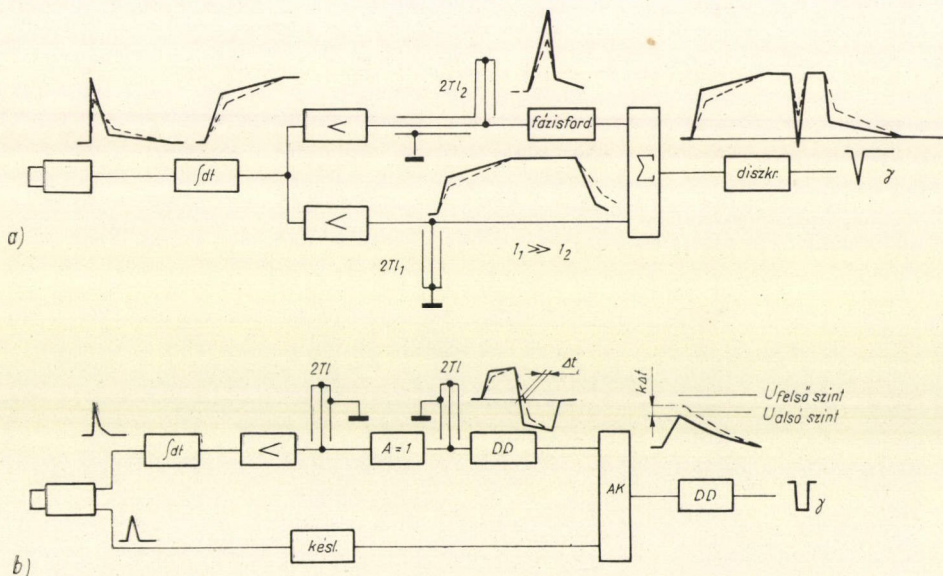


28. ábra. A sokdetektoros mérőrendszer blokkvázlata

impulzus esetén egyenként 8 bit, egy impulzus esetén 16 bit. Az átmeneti tárolást két 16 bites tároló-címregiszter biztosítja.

Az azonos csoportba tartozó neutrondetektorok 13. dinódájáról vett impulzusokat összeadó kapun keresztül kétszeres művonalas formálással rendelkező erősítőre E_1 , E_2 , majd pedig a megfelelő MADÁ-k egyik-egyik bemenetére vezetjük. Az amplitúdóval arányos impulzussorozatot a címregiszterek második 8 bitjében tároljuk.

(n , $2n$) mérésnél regisztrálást csak akkor végzünk, ha két különböző csoportba kapcsolt neutrondetektor szólalt meg. Ezt a feladatot az egyes detektorok pozíciókódját előállító „Pozíciókódoló” egység végzi a kimenetén (az üzemmódtól függően) előálló kódok helyességének, illetve helytelenségének vizsgálatával. A pozíciókódoló a neutrondetektorok 12. dinódáiról kapja a vezérlő jeleket és előállítja a megszólaló detektornak megfelelő pozíciókódot, valamint a részecske-azonosító kódot a neutron és gamma megkülönböztetésére. A pozíciókódoló egyben előállítja a tárolást kapuzó vezérlő jelet is. (n , $2n$) mérésénél ez az impulzus csak a két neutrondetektor-csoport közötti koincidencia-jel hatására jelenik meg. Amennyiben egy detektor-csoportban egynél több detektor szólal meg egyszerre (kb. 0,5 μ sec-on belül), akkor a tárolórészben kapuzó jel nem jelenik meg.



29. ábra. Gamma-neutron jelalak diszkriminálás szemléltetése
b) amplitúdó analízis esetén a) zérus átmenet időpontjának kijelölésével

A neutronoktól és gammáktól származó impulzusok megkülönböztetése, illetve külön-külön való tárolásuk az ún. jelalakdiszkriminálás alapján történik. A jelalak-diszkrimináció a szcintillátor azon tulajdonságán alapszik, hogy a szcintilláció egy gyors és egy lassú utánvilágítású komponenssel rendelkezik és ezen két komponens amplitúdó-aránya a szcintillációt kiváltó részecske fajtájától, $\frac{e}{m}$ viszonyától függ. A 29. ábra két eljárást vázol a jelalak-diszkrimináció megvalósítására. A 29/a

ábra az amplitúdó analízis elvén alapuló eljárást vázolja: a szcintillációs folyamat során kialakuló jel különböző, megfelelően megválasztott időpontokban vett amplitúdókülönbségeinek alapján kapjuk meg azt, hogy a szcintillációt neutron, vagy gamma váltotta ki; a 29/b ábrán pedig az impulzus kétszeres differenciálásával nyert jel zérus átmenete időeltolódásának kiértékelésével. Mindkét típusú megoldás alkalmasnak látszik sokdetektoros mérőrendszerben való felhasználásra. Sőt az amplitúdó-elven működő megoldás azáltal, hogy a közelítést jelentő analóg áramkörök elmaradnak, és a kiértékelés számológéppel történik, pontosabbá válik. Az időelven történő diszkriminálásnál az analóg áramkörök elhagyása nem lehetséges, de ezek az áramkörök közösek lehetnek mindkét detektorcsoportban. Az amplitúdó-elven működő gamma-diszkriminációnál több adatot kell tárolni és a számológépbe átírni. Sokdetektoros mérőrendszerünk kialakításánál az időeltolódás elvén működő gamma-szelektálást részesítettük előnyben, amely irodalmi adatok, valamint saját próbaméréseink szerint kielégítő megoldást nyújt. Mindezek ellenére az interfaceben biztosítottuk annak a lehetőségét, hogy egy további MADA és címregiszter felhasználásával amplitúdó-elven történő gamma-diszkriminációt is tudjunk végezni.

A zérus átmenet időpontjának kijelölésével való alakdiszkrimináció érdekében mindkét detektorcsoportnál az össztöltés begyűjtése útján az E_1 és E_2 erősítőkről kétszeres művonalas differenciálással nyert jelet és a jel beérkezését kijelölő gyors diszkriminátor megfelelően késleltetett kimenőjelét az IAK_3 , illetve IAK_4 idő-amplitúdó-konverterbe vezetjük. A null-átmenet kijelölését a DD_1 és DD_2 differenciáldiszkriminátorok végzik, ami lehetővé teszi, hogy a hatásfok romlása árán azok a jelek, amelyekre a jelalak-diszkriminálás nem kielégítő, a mérésből kihagyhatók legyenek. A konverterek kimenő jelei közül a DD_3 és DD_4 differenciáldiszkriminátorral a neutronoknak, vagy a gammáknak megfelelő impulzusokat választjuk ki. A két detektorcsoport jelalak-diszkriminátorának kimenő jelei koincidenca-áramkörön és pozíciókódolón keresztül kapuzzák a MADÁ-kat és az analízist csak akkor engedik meg, ha a detektorok neutronokat detektáltak. Ha a jelalak-diszkriminációt végző idő-amplitúdó-konverter kimenetére két differenciáldiszkriminátort kapcsolunk a gamma és a neutron helyzetének megfelelően és azok kimenetei, valamint a pozíciókódoló közé megfelelő logikai áramkört iktatunk be, a detektorok pozíciókódja a neutron és gamma megkülönböztetésére alkalmas kóddal egészül ki.

A véletlen koincidenciák helyes meghatározásához, tekintve, hogy a gyorsító hozama nem állandó, regisztrálni kell az intenzitás négyzetével és köbével arányos mennyiségeket (lásd V. 3. §). Ezt a célt szolgálják a K_1 és K_2 koincidenca-berendezések. Megfelelő késleltetések beállításával ezek csak véletlen koincidenciákat regisztrálnak:

$$K_1 \sim \int N^2(t) dt \quad K_2 \sim \int N^3(t) dt$$

ahol $N(t)$ az intenzitás. A véletlen koincidenca-korrekciónál megállapításánál, tekintve az N^2 és N^3 „monitorok”, valamint a mérőberendezés megfelelő egységeinek eltérő időfelbontását, normálási faktorokat kell meghatározni. Ennél a mérésnél az idő-amplitúdó-konverterek és a K_0 koincidenca-berendezés bemenetei elé rendre késleltetéseket iktatunk be.

A 28. ábrán szereplő többi egység feladatai a következők: a negyedik címregiszter monitorszkéler szerepét tölti be. Tartalma az „Időzítő” által kijelölt idő-

pontokban periodikusan „interrupt” üzemmódban kerül beolvasásra. A „Lineáris multiplexer” a gyorsító beállítását és ellenőrzését szolgálja. A bemenetén megjelenő, maximum nyolc különböző feszültségértéket a monitor tartalmától függően, vagy periodikusan olvassuk be. A vezérlés céljára az „Analóg kimenet” és a „Digitális kimenet” szolgál. Utóbbi 12 kimenettel rendelkezik, amelyeken a programtól függően jelenik vagy nem jelenik meg feszültség. A „Display” a mérési eredmények ábrázolását biztosítja a mérőszobában, illetve a kihelyezett „Monitor” révén a target-helyiségben. A „Naplózó” egy óragenerátor, amelynek segítségével a regisztrálási időt, illetve dátumot állítjuk elő.

(n , $2n$) mérésnél egy regisztrált eseményhez hozzárendelhető cím hat, egyenként 8—8 bit tartalmú kódból áll. A 48 bit az adatredukció során jelentősen lecsökken, de tekintve, hogy a TPA memóriája 4096 rekesz és hogy a programok is helyet foglalnak el, integrálól üzemű analízis általában nem lehetséges. A betárolt címeket, miután a memória kijelölt része betelt, digitális magnóra írjuk át. A mérés befejezése után a magnóról az adatokat visszaolvashatjuk és közben a kívánt analízis megtörténhet. A további perifériák: FS 1500 gyors szalagolvasó, PE 1500 gyors-perforátor és a Teletype írógép.

12. §. Előzetes adatfeldolgozás (n , n') mérésnél

A sokdetektoros mérőrendszer felhasználásával végezhető különböző típusú méréseknek, vagyis a rendszer különböző üzemmódjainak különböző programok felelnek meg. Ezek természetesen sok közös szubrutint tartalmaznak. Az alábbiakban a mérési eljárást és a szükséges programok blokksémáját (n , n') típusú mérés esetére vázoljuk.

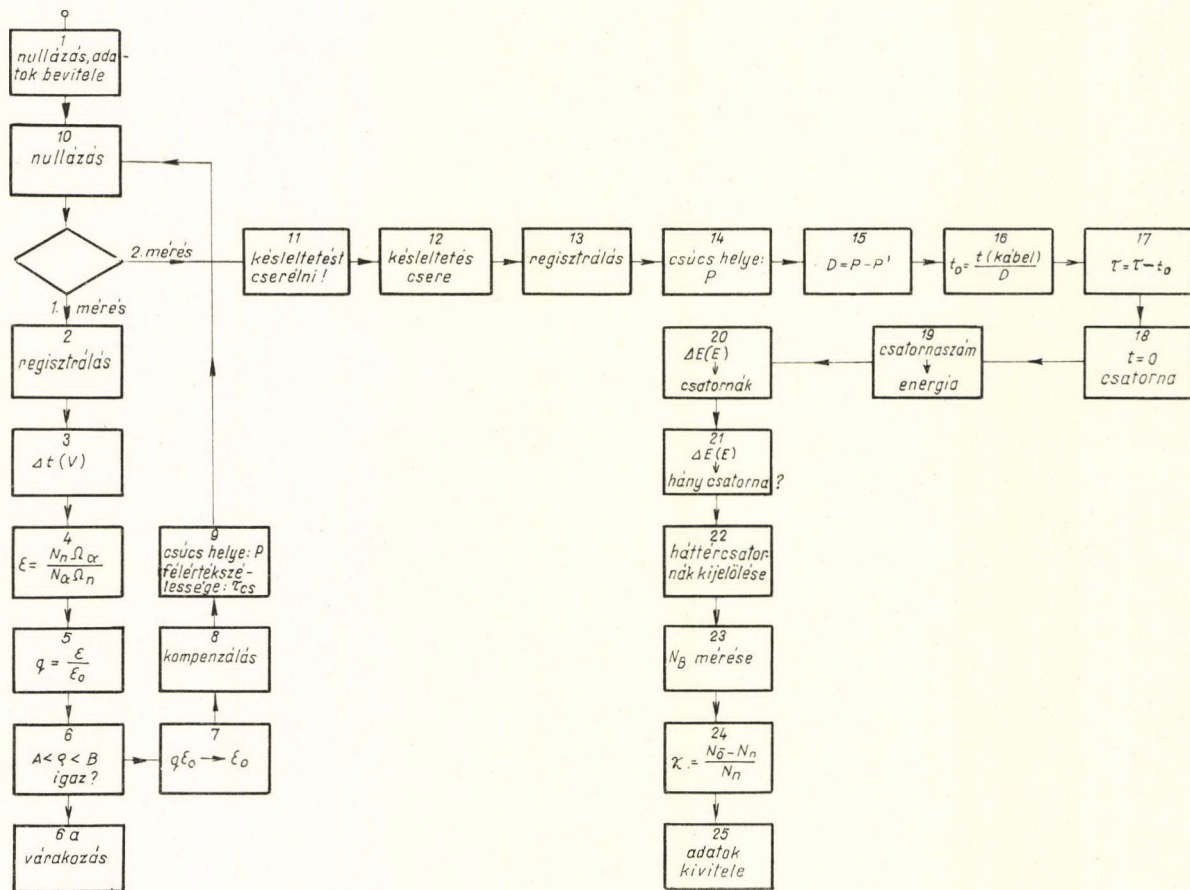
A mérés a következő lépésekből áll: *a)* a detektorok összehangolása, *b)* előmérés, *c)* szögeloszlás-mérés, *d)* monitorozás, *e)* adatfeldolgozás.

a) A detektorok összehangolása

A detektorok beállítását a 14 MeV-es neutronok amplitúdóspektruma, valamint különböző gamma-preparátumok amplitúdóspektruma alapján végezzük el. Tekintve, hogy a detektorok analóg kimenetei egyesítve vannak, nagy gondot kell fordítani az amplitúdók összehangolására. Ezt az elektronsokszorozók és szcintillátorok összeválogatásával és a nagyfeszültség megfelelő beállításával kielégítően biztosítani lehet. A nagyfeszültséget szabályozva a különböző detektoroknál azonos alakú és beütésszámban összeeső amplitúdóspektrumokat kell kapni. Erre a munkára a számológépet amplitúdó-analízis és folyamatos ábrázolás üzemmódban használjuk.

b) Előmérés

Az előzetes adatfeldolgozás paramétereinek megállapításához előmérést végzünk. Az előmérés során egy neutrontektort a direkt térszögben helyezünk el. Meg kell határozni az időfelbontás javítására szolgáló kompenzációs függvényt,



30. ábra. Az előmérés programjának vázlata

a hatásfokot, a repülési csúcs helyét, a csatornaidőt, az időfelbontást, a csatorna-szám és energia-megfeleltetést, a háttércsatornákat és a háttérarányt. A szükséges számológép-program elvi vázlata a 30. ábrán látható.

1. A gép nullázása, kezdőcímek betárolása és adatok bevitele. Ilyenek például a neutrondetektor hatásfoka különböző energiáknál, az analógági küszöb V_0 , a konverter lineáris tartományának vége V_m , stb.
2. Regisztrálás. A detektor analógjeleit (V) és az idő-amplitúdó konverter jeleket (T) kétdimenziós integráló üzemben analizáljuk, ha az analógjelek V_0 küszöbnél nagyobbak. V_0 azonos azzal a küszöbvel, amire a betárolt hatásfok-értékek vonatkoznak. A csatornabontás például $128(V) \times 16(T)$. Ezeket az adatokat az inicializálásnál betápláljuk. A kétdimenziós analízissal egyidejűleg egy rekeszben, a repülési-időtől függetlenül, az összes küszöb feletti jelet gyűjtjük. Így azon impulzusok számát kapjuk, amelyek V_0 -nál nagyobbak és tartozik hozzájuk alfa, vagyis biztosan 14 MeV-es neutronról származnak (N_n). Ezt felhasználjuk a 14 MeV-es neutronokra vonatkozó abszolút hatásfok megállapításánál.
3. A kétdimenziós spektrumból meghatározzuk az időfelbontás javítására az ún. kompenzáló függvényt. Ha a plaztik szcintillátorban meglökött proton amplitúdóspektrumából csak keskeny intervallumot veszünk figyelembe, akkor a különböző jelfelfutásból eredő időszórás elhanyagolható lesz az egyéb okokból eredő időszórás mellett. A betárolt kétdimenziós spektrumból minden V -nél sorra meghatározzuk az adott V -hez tartozó repülési csúcs helyét és ezt levonjuk a maximális V -hez tartozó repülési csúcs helyéből. Az összetartozó V és Δt értéket tároljuk.
4. A regisztrálás során egy rekeszben megszámláljuk a neutrondetektor küszöb feletti megszólalásainak számát (N_n) és a monitor tartalma alapján rendelkezésre áll a mérés alatti alfa-impulzusok száma N_n . Ezekből, valamint az inicializálásnál betárolt térszögadatokból meghatározzuk a detektor abszolút hatásfokát 14 MeV-en:

$$\varepsilon(V_0, E_0) = \frac{N_n \Omega_\alpha}{N_\alpha \Omega_n}$$

5. Képezzük ennek és a betárolt 14 MeV-es hatásfokérték, ε_0 hányadosát:

$$q = \frac{\varepsilon(V_0, E_0)}{\varepsilon_0(V_0, E_0)}$$

6. Megvizsgáljuk, hogy ε és ε_0 nem tér-e el jelentősen egymástól:

$$A < q < B.$$

A és B értékét szintén az inicializálásnál kell betárolni.

- 6a Ha a fenti egyenlőtlenség nem teljesül, a gép kiírja ε -t és leáll. Meg kell vizsgálnunk, hogy mi az oka a túl nagy eltérésnek.
7. Ha az egyenlőtlenség teljesül, a mért hatásfokértékkel átnormáljuk az inicializálásnál betáplált hatásfok-értékeket és az új adatokat tároljuk be a korábbiak helyére:

$$q\varepsilon(V_0, E) \rightarrow \varepsilon_0(V_0, E).$$

8. A $V \times T$ kétdimenziós spektrummal a következőképpen járunk el: minden V -hez tartozó spektrumot a Δt értékkel eltolunk és azután az azonos T -hez tartozó csatornatartalmakat összeadjuk. Így egy jó statisztikájú „kompenzált” repülési-csúcsot kapunk.
9. Meghatározzuk a csúcs helyét (P) és félértékszélességét csatornaszámban (τ_{cs}). Ezeket és a repülési-csúcsokat a továbbiakban tároljuk.
10. A kétdimenziós spektrumra a továbbiakban nincs szükség, a megfelelő regisztereket nullázzuk.
11. A gép késleltetést kér.
12. Késleltető kábelt iktatunk be a konverter bemenetére, a késleltetés értékét (t_{kabel}) beírjuk és újra elindítjuk a regisztrálást.
13. Repülési csúcsot veszünk fel, minden adatpár (V, T) beolvasása után végrehajtjuk a kompenzálást

$$T := T + \Delta t(V).$$

14. Megkeressük a csúcs helyét (P') és tároljuk.
15. Meghatározzuk a két csúcs távolságát csatornaszámban: $D = P - P'$.
16. Kiszámítjuk a csatornaidőt: $t_0 = \frac{t_{kabel}}{D}$.
17. A jó statisztikájú csúcsra meghatározzuk a felbontási időt: $\tau = \tau_{cs} t_0$.
18. Meghatározzuk a 0 időnek megfelelő csatornát:

$$P_0 = P + \frac{L}{t_0} \sqrt{\frac{m}{2E_0}}$$

ahol L a repülési távolság, m a neutrontömeg, E_0 a neutronenergia, P a csúcs helye. L, m, E_0 értékeit az inicializálásnál tároljuk be.

19. Minden csatornaszámhoz hozzárendeljük a megfelelő energiát. Az x csatornának megfelelő energia:

$$E_x = \frac{L^2 m}{2t_0^2 E_0} \cdot \frac{1}{(P_0 - x)^2}$$

20. Az inicializálásnál betároltuk, hogy milyen maximális és minimális értékek között és hány csatornára kívánjuk felosztani az energiaspektrumot. Ezzel adva van az analízis csatornaszélessége.

$$\Delta E = \frac{E_{\max} - E_{\min}}{n}$$

Meghatározzuk, hogy az egyes energiacsatornáknak mely időcsatornák felelnek meg.

21. A szögeloszlás-mérésnél a háttérrel egy rekeszben fogjuk tárolni. Az egyes energiacsatornákból a háttérrekesz tartalmát olyan súllyal kell figyelembe venni, ahány időcsatorna tartozik a megfelelő energiacsatornába. Ezért egy tömbbe sorra beírjuk az egyes energiacsatornáknak levő időcsatornák számát, ezen tömb adatai lesznek a súlyfaktorok a háttérkorrekció elvégzésénél.
22. Kijelöljük a háttércsatornákat. Ezek: $t=0$ időnek megfelelő csatorna és a maximális amplitúdónak, pontosabban a konverter lineáris tartományának vége közötti csatornák.

23. Mérjük a V_0 küszöb feletti jelek számát koincidencia-feltétel nélkül. Ez megadja a 14 MeV-es neutronoktól és a háttértől származó impulzusok összegét.
24. A kétdimenziós analízisnél koincidencia-feltétellel meghatároztuk N_0 -t a V_0 feletti jelek számát. Az előbbiek és ennek alapján kiszámítjuk a háttérviszonyt:

$$\chi = \frac{N_{\text{összes}} - N_n}{N_n}$$

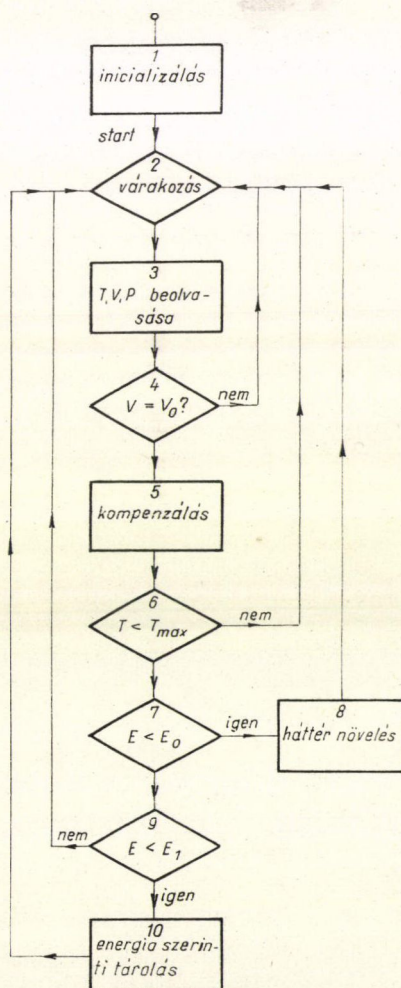
25. Vége az előmérésnek. Kivisszük a következőket: Jó statisztikájú kompenzált repülési csúcsot, a csúcs helyét, a csatornaidőt, a felbontási időt és a háttérviszonyt. A gépben benn marad a mérésben való felhasználás céljaira a kompenzáló függvény, a hatásfok-görbe, a csatornaszám-energia-csatorna leképzés, a különböző energiacsatornáknak levő időcsatornák száma és a háttércsatornák címe.

Az előmérés után ellenőrizzük, hogy az előmérés során az egyik detektorral felvett adatok megfelelnek-e a többi detektor esetében. E célból a detektorokat rendre betesszük a térszögbe az előméréssel azonos L távolságra és felvesszük a 14 MeV-es neutronok repülési csúcsát kompenzálva, az előmérésben felvett kompenzációs függvény felhasználásával. Meghatározzuk a felbontási időket, valamint a hatásfokokat 14 MeV-en.

c) Szögeloszlás mérése

A detektorokat a vizsgálandó targettól azonos L távolságban különböző szögekben helyezük el. Négy mennyiséget kell beolvasni: a repülési időt (T), az analógági amplitúdót (V) és a pozíciókódot (P) eseményenként, valamint a monitort periodikusan. A program blokksémája a 31. ábrán látható.

1. Inicializálás, ami még a „start” előtt történik.
2. A gép várja, hogy a T , V , P regiszterek tartalma kialakuljon.
3. T , V , P beolvasása.
4. Megvizsgáljuk, hogy V tartalma a küszöb felett van-e ($V > V_0$), ha nem, visszatérünk 2-be.



31. ábra. Szögeloszlás-mérés programjának vázlata

5. Végrehajtjuk a kompenzálást.
6. Megvizsgáljuk, hogy az impulzus a konverter lineáris tartományába esik-e ($T < T_{\max}$). Ha nem, visszatérünk 2-be.
7. Megvizsgáljuk, hogy az impulzus háttérnek számít-e? Két esetet érdemes megkülönböztetni: kisenergiájú, vagy nagyenergiájú spektrumot mérünk. Kisenergiájú spektrumnál bennünket csak valamely E_1 energiáig terjedő spektrum érdekel. Fölötte a rugalmasan szórt csúcs van, amely gyakorlatilag összeesik a gamma csúccsal, ha nincs alakdiszkrimináció. A gamma, illetve rugalmas csúcs helye feletti $E > E_0$ csatornák lesznek a háttércsatornák. Az $E_1 < E < E_0$ jeleket nem analizáljuk. Nagyenergiás spektrumnál a rugalmas, és a közvetlenül alatta levő tartományt, vagyis az alacsonyan fekvő nivókat gerjesztő nagyenergiájú szórt neutronokat mérjük. Ebben az esetben a késleltetést úgy választjuk meg, hogy a gamma csúcsa közel legyen a konverter lineáris tartományának végéhez. A háttércsatornák a rugalmas csúcs és a gamma-csúcs között lesznek.
8. Ha $E < E_0$ nem teljesül, az impulzus háttérnek számít és a P -nek megfelelő háttérrekesz tartalmát 1-gyel megnöveljük.
9. Megvizsgáljuk, hogy az impulzus az analizálandó tartományba esik-e, ha nem, visszatérünk 2-be.
10. A P -nek megfelelő blokkban energia szerint tároljuk az impulzust.

d) Monitorozás

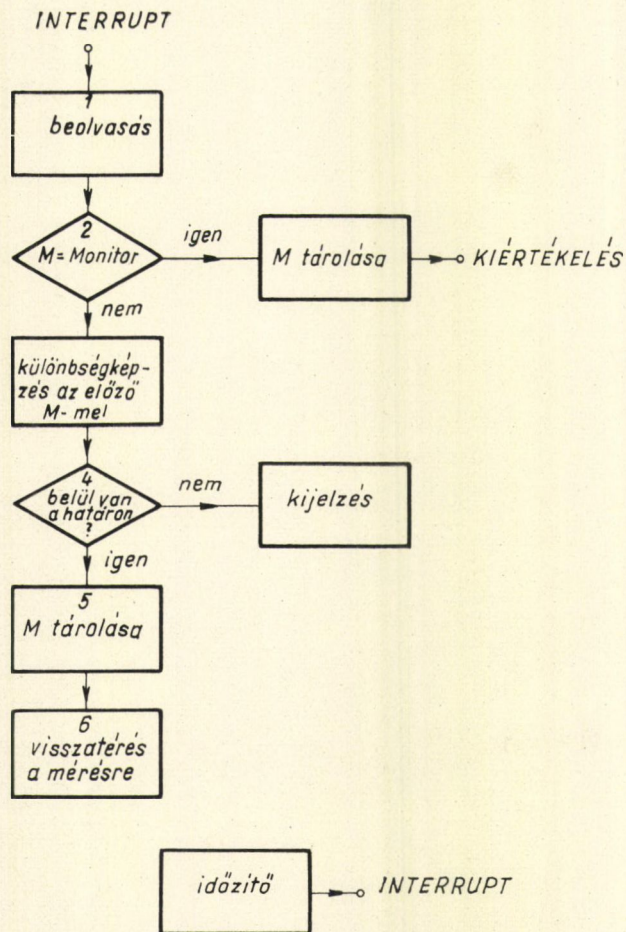
A monitorozás párhuzamosan történik a méréssel interrupt üzemmódban (32. ábra).

1. A monitor címregiszter tartalmát beolvassuk (M).
2. Megvizsgáljuk, hogy elértük-e az előzetesen beírt monitor-értéket. Ha igen, M -et beírjuk, a regisztrálás befejeződik és kezdődik a kiértékelés.
3. Ha nem, képezzük a különbséget a megelőző M -mel.
4. Megvizsgáljuk, hogy az eltérés az előre megadott határokon belül marad-e. Ha nem, kiírjuk az intenzitást és a gép beavatkozást vár.
5. Ha igen, a beolvasott M értékét a régi helyére írjuk.
6. Visszatérés a mérésre.

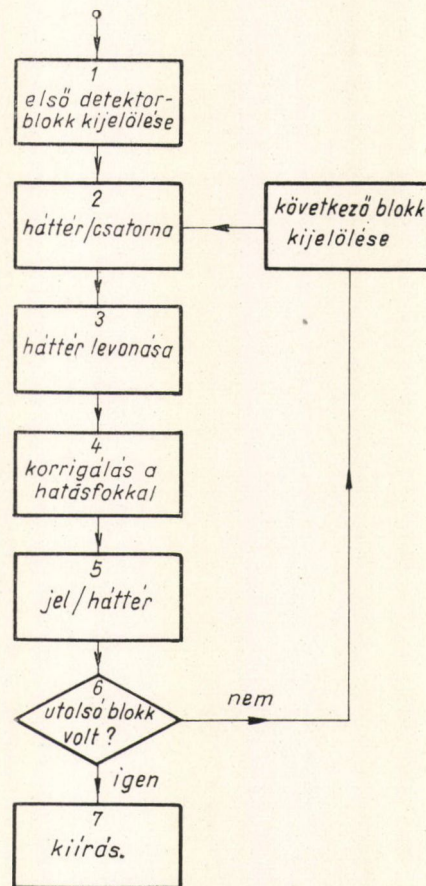
e) Előzetes adatfeldolgozás

A program blokksémája a 33. ábrán látható.

1. Első detektor blokk kijelölése.
2. Háttér/csatorna kiszámítása.
3. A háttér levonása a spektrumból.
4. A spektrumot korrigáljuk a hatásfokkal: $\frac{N(E)}{\varepsilon(E)}$.
5. Jel/háttér képzése.
6. Utolsó detektornak megfelelő blokk volt-e? Ha nem, a következő blokk kijelölése.
7. Ha igen, kivisszük az adatokat. Ezek a következők: a monitoradat, a spektrumok és a jel/háttér.



32. ábra. A monitorozás programjának vázlata



33. ábra. Az előzetes adatfeldolgozás programjának vázlata

B) MAGFIZIKAI KÍSÉRLETEK

IV. Az $(n, 2n)$ magreakció

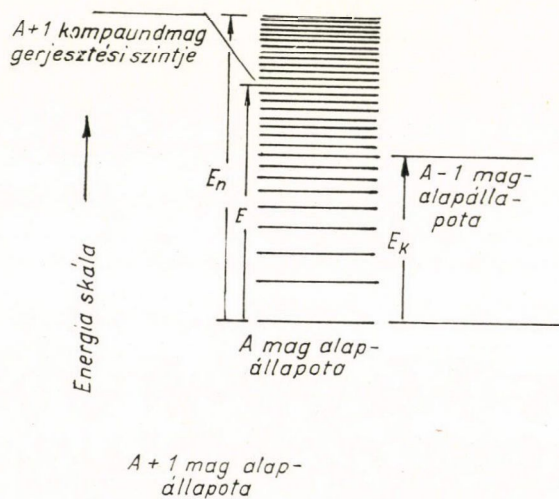
1. §. Bevezetés

Az $(n, 2n)$ magreakcióban a bombázó neutron ütközik az A tömegszámú, Z rendszámú maggal, ami két neutron és egy $A-1$ tömegszámú, Z rendszámú atommag keletkezésére vezet. A reakció küszöbenergiája (E_k), az a minimális kinetikus energia, amivel a bombázó neutronnak rendelkeznie kell, egyenlő az A mag utolsó neutronjának kötési energiájával, ami általában 7–8 MeV körül van. A 34. ábra az energiaviszonyokat ábrázolja. Az $A+1$ rendszer gerjesztési szintje E_n -nel, a bombázó energiával magasabb mint az A mag állapota. Ha az $A+1$ rendszerből kilépő neutron E energiát visz el és ezzel az A magot E_k -nál alacsonyabb gerjesztésben hagyja, második neutron nem léphet ki. Ha a gerjesztés E_k felett van, kiléphet a második neutron és visszamarad az $A-1$ mag.

Néhány MeV tartományban a gyorsneutron reakciókat általában a kompaund magmodell alapján tárgyalják. A folyamat hatáskeresztmetszetére Blatt és Weisskopf [B152] nyomán a következő kifejezést alkalmazzák:

$$\frac{\sigma_{n, 2n}(E)}{\sigma_{n, M}(E)} = \frac{\int_0^{E-E_k} E' \sigma_c(E') W(E' - E') dE'}{\int_0^E E' \sigma_c(E') W(E - E') dE'} \quad (1)$$

ahol $\sigma_{n, M}$ valamennyi neutronemissziós folyamat hatáskeresztmetszetét jelöli,



34. ábra. Az $(n, 2n)$ magreakció energia-viszonyainak szemléltetése

tekintet nélkül arra, hogy egy vagy több neutron lép ki, $\sigma_c(E)$ a kompaund mag kialakulásának hatáskeresztmetszete és $W(E)$ a nívósűrűség. (1) formula levezetésénél kihasználták az ún. Weisskopf-hipotézist: ha a mag gerjesztése nagyobb mint E_k , tehát második neutron kilépése energetikailag lehetséges, ez meg is történik. Más szavakkal ez azt jelenti, hogy a töltött részecske kibocsátás és gammával való legerjesztődés valószínűsége elhanyagolható a neutronkibocsátás mellett. Ha (1)-be a nívósűrűséget a Fermi-féle gázmodell alapján behelyettesítjük, az ún. „Weisskopf becslést” kapjuk:

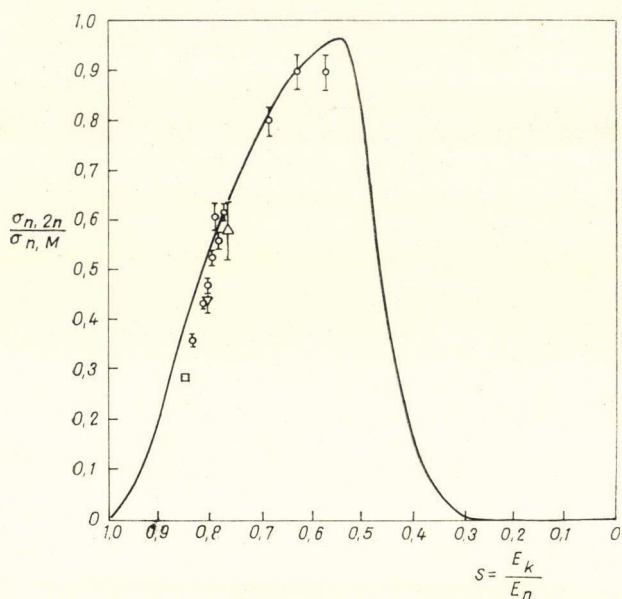
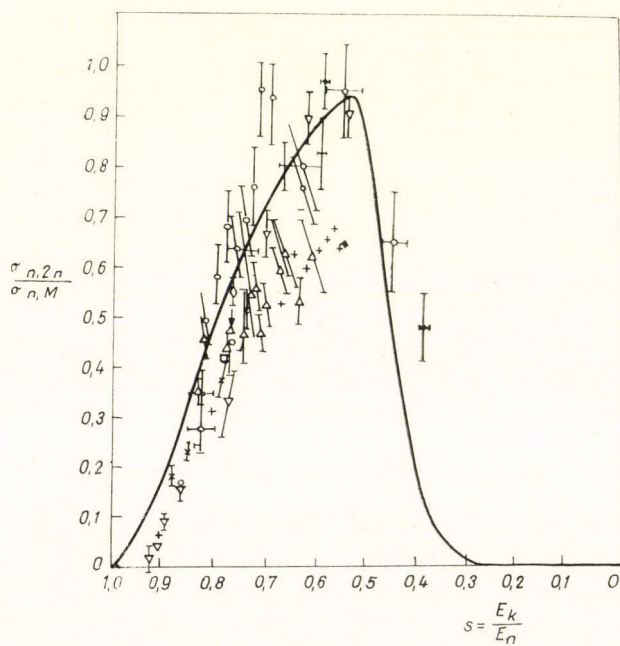
$$\frac{\sigma_{n,2n}(E)}{\sigma_{n,M}(E)} = 1 - \left[1 + \frac{E - E_k}{T} \exp\left(-\frac{E - E_k}{T}\right) \right] \quad (2)$$

ahol T a közbenső maradék mag hőmérséklete. Ezen formulák ellenőrzésével és javításával sokan foglalkoztak, pl. [Co59], [Mo60], [Ba61]. Vizsgálták (2) levezetésénél az alkalmazott matematikai közelítések jóságát, $\sigma_c = \text{const}$ feltevés szerepét, különböző nívósűrűség kifejezések hatását, valamint figyelembe vették a héjszerkezetet és a nívósűrűség spinfüggését. Ezek alapján Pearlstein [Pe64] az $(n, 2n)$ hatáskeresztmetszetre a következő kifejezést adja meg:

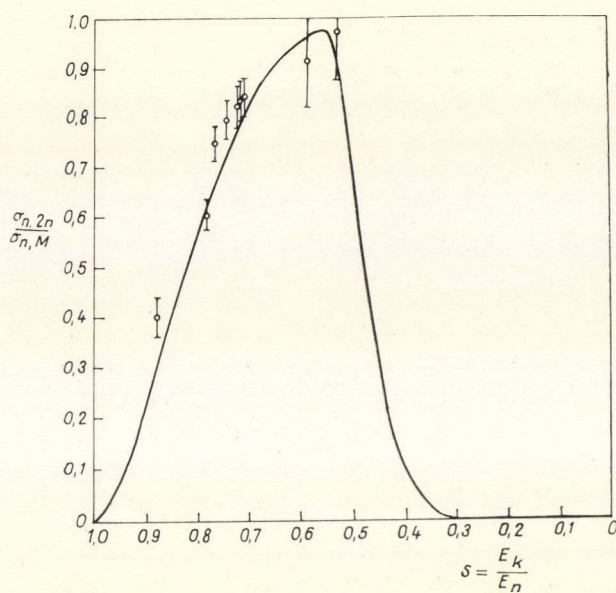
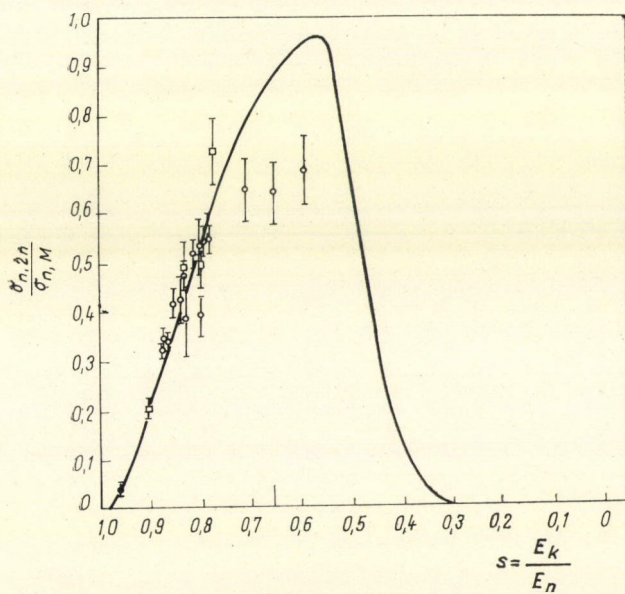
$$\frac{\sigma_{n,2n}}{\sigma_{n,M}} = 1 - \frac{e^{p^{1/2}} \left[\left(1 - \frac{1}{s} \right) p^{s/2} - \left(3 - \frac{1}{s} \right) p + 6p^{1/2} - 6 \right] + 6 - \frac{p}{s}}{e^{\left(\frac{p}{s} \right)^{1/2}} \left[-2 \left(\frac{p}{s} \right) + 6 \left(\frac{p}{s} \right)^{1/2} - 6 \right] + 6 - \frac{p}{s}} \quad (3)$$

ahol $p = 4aE_k$, $s = \frac{E_k}{E}$ és a $W(E) \sim e^{\sqrt{2aE}}$ Fermi-féle nívósűrűség kifejezésben szereplő nívósűrűség paraméter. Pearlstein (3)-at számológépre programozta és mintegy 150 magra kiszámította a hatáskeresztmetszetet 13,1; 14,1 és 15,1 MeV energiára, amit táblázatban adott meg. Több magnál széles energiatartományban az energia függvényében végezte el a számítást. A szükséges paramétereket számítással, illetve a nívósűrűség kísérleti adataihoz való illesztés alapján származtatta. A 35. és 36. ábrák példaként négy ilyen görbét tartalmaznak. Az egyes görbéket a rajtuk elhelyezett kísérleti adatokhoz normálta, vagyis olyan $\sigma_{n,M}$ értéket választott, hogy a kísérleti adatok a lehető legjobban illeszkedjenek a görbék alakjához. Az ábrák azt mutatják, hogy empirikus paraméterek alkalmazásával és a kísérleti adatokhoz való normálással sem lehet a compaund elmélet alapján származtatott görbéket és a kísérleti adatokat teljes fedésbe hozni. Ebben szerepet játszik az, hogy kevés a kísérleti adat, nagy az adatok szórása és a szisztematikus hibák okozta bizonytalanság. Pearlstein ábrái szemléletesen mutatják a kompaund modell és az $(n, 2n)$ hatáskeresztmetszet adatok egyezésének mértékét: a hatáskeresztmetszet menetét jól „megjósolja” a compaund elmélet. Teljes egyezést, ha figyelembe vesszük a kísérleti adatokkal kapcsolatban felsoroltakat, valamint azt, hogy a számítás még mindig sok feltevést és közelítést tartalmaz, nem is várhatunk. Azonban azt a következtetést sem lehet levonni, hogy ezen elmélet alapján a folyamatot teljesen le lehet írni.

Az $(n, 2n)$ kísérleti adatok rendszerezésénél megállapított fenomenológiai törvényszerűségek kérdésével foglalkozunk a következő §-ban, majd a 3. §-ban a direkt mechanizmus lehetőségére mutatunk rá.

a) ^{45}Se , teljes skála 565 mbb) ^{63}Cu , teljes skála 1000 mb

35. ábra. A compaund elmélet alapján számított $(n, 2n)$ hatáskeresztmetszet és a mérési adatok összevetése [Pe-64]

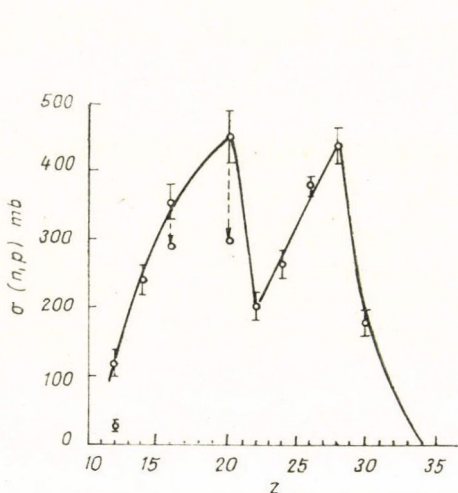
a) ^{85}Rb , teljes skála 1814 mbb) ^{89}Y , teljes skála 1375 mb

36. ábra. A compaund elmélet alapján számított $(n, 2n)$ hatáskeresztmetszet és a mérési adatok összevetése [Pe64]

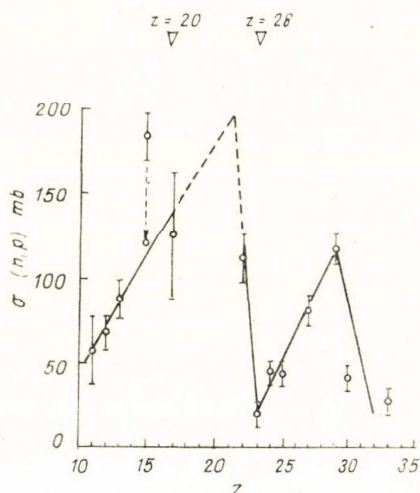
2. §. A héjfeffektusok problémája

Az utóbbi években többen foglalkoztak a 14 MeV energiájú neutronokkal végzett kísérletek adatainak rendszerezésével és értelmezésével. A széles magtartományban megfigyelhető általános tendenciáktól a mágikus számok környékén eltéréseket állapítottak meg, amelyeket az állapotsűrűség, a párenergia és a küszöbenergia héjfeffektusaival magyaráztak.

A héjfeffektusok kérdése először *Allan* [Al61] munkájában merült fel, amelyben a compaund magmodell ellenőrzése céljából 14 MeV energiájú neutronokkal végzett (n, p) hatáskeresztmetszet méréseiről számol be. Megállapítja, hogy a $Z=20$ és 28 zárt héjaknál a hatáskeresztmetszetekben maximumok vannak (37. és 38. ábrák). Bár a hatáskeresztmetszetnek a küszöbenergia függvényében való ábrázolása ugyan-csak eltérést mutat a sima menettől, a szerző következtetése szerint az (n, p) hatáskeresztmetszetben jelentkező maximumokért a nívósűrűség hirtelen változása felelős a szóban forgó zárt héjaknál.



37. ábra. $\sigma(n, p)$ Z függvényében páros-páros magokra [Al61]



38. ábra. $\sigma(n, p)$ Z függvényében páratlan-páros és páros-páratlan magokra [Al61]

Allan munkáját követően többen állították, illetve cáfolták a héjfeffektusok létezését: [St62], [Ga62], [Je63], [Ch63], [Ga64]. Az (n, p) reakció kísérleti adatainak elemzése után *Gardner* és *Rosenblum* [Ga67] arra a következtetésre jutott, hogy az adatok pontossága mellett nem lehet héjfeffektus létezésére következtetni. A reakció hatáskeresztmetszetét széles tömegszám-tartományban a kísérleti adatokkal jó egyezésben írja le Levkovszki empirikus képlete [Le63]:

$$\frac{\sigma_{n,p}(A + \Delta A, Z)}{\sigma_{n,p}(A, Z)} \approx \exp \left[75 \left(\frac{Z}{A + \Delta A} - \frac{Z}{A} \right) \right]$$

ahol A és Z a tömegszám, ill. a rendszám.

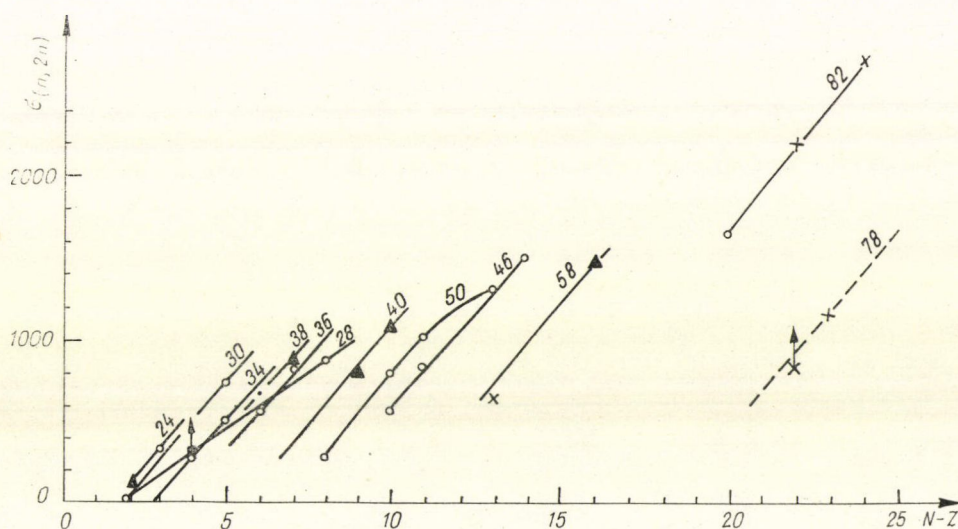
A héjefektusok létezésének kérdése az $(n, 2n)$ reakció esetében kevésbé tisztázott, mint az (n, p) reakciónál. Érdekes fizikai információt jelentene annak eldöntése, hogy magas gerjesztési energiánál, ahol az $(n, 2n)$ reakció már valószínű, jelentkeznek-e a hatáskeresztmetszetben héjszerkezeti effektusok. Ilyen megfigyelésekről többen beszámoltak, ugyanakkor mások kísérleteik alapján arra a következtetésre jutottak, hogy héjefektusok nem mutathatók ki: [Bo65], [Ma65], [Cu65], [Ri65], [Hi68].

Érdekes megfigyelést közölt Csikai [Cs67]: az $(n, 2n)$ hatáskeresztmetszet értéke erősen függ a bombázó energia és a küszöbenergia különbségétől. Ezért Csikai és munkatársai az E_k küszöbenergiától állandó ΔE értékkel magasabb gerjesztésnek megfelelő bombázó energiákon mérték a hatáskeresztmetszetet. Így az E_k héjefektusát kiküszöbölték. Eredményeiket a 39. ábra tartalmazza. Széles neutronszám tartományban $30 \leq N \leq 120$, a hatáskeresztmetszet $N-Z$ -től való függését azonosnak találták. Ezt a függést a következő kifejezéssel adják meg:

$$\sigma(Z \pm \Delta Z, N) = \sigma(Z, N) \mp m(E - E_n)\Delta Z,$$

$$m = 231 \text{ mb} \quad \Delta E = 3 \text{ MeV}$$

esetén.



39. ábra. Az $(n, 2n)$ hatáskeresztmetszet $N-Z$ függvényében, N paraméter. Pontok: $E_n = E_k + 3 \text{ MeV}$ energiánál mért értékek. Háromszögek: $E_n = 14,7 \text{ MeV}$ energiánál mért és $E_n = E_k + 3 \text{ MeV}$ -re átszámított adatok (Cs67)

Csikai eredménye arra mutat, hogy a neutronkibocsátás valószínűsége a relatív neutronfelesleggel kapcsolatos. A Levkovszki képlet szerint a protonkibocsátás valószínűsége nő a relatív protonszám növekedésével. Hasonlóan, növekvő $\frac{N-Z}{A}$ -nál növekvő $(n, 2n)$ hatáskeresztmetszetet várhatunk. Ennek kimutatására Jéki-vel a Levkovszki-képlethez hasonló kifejezést illesztettünk az $(n, 2n)$ hatáskeresztmetszet adatokhoz [A69]. Ahhoz, hogy az $(n, 2n)$ hatáskeresztmetszetek alapján

a héjefektusok létezésére következtethessünk, Csikai eljárását alkalmaztuk: $E - E_n = 3$ MeV-nek megfelelő bombázó energiánál hasonlítottuk össze a hatáskeresztmetszet adatokat.

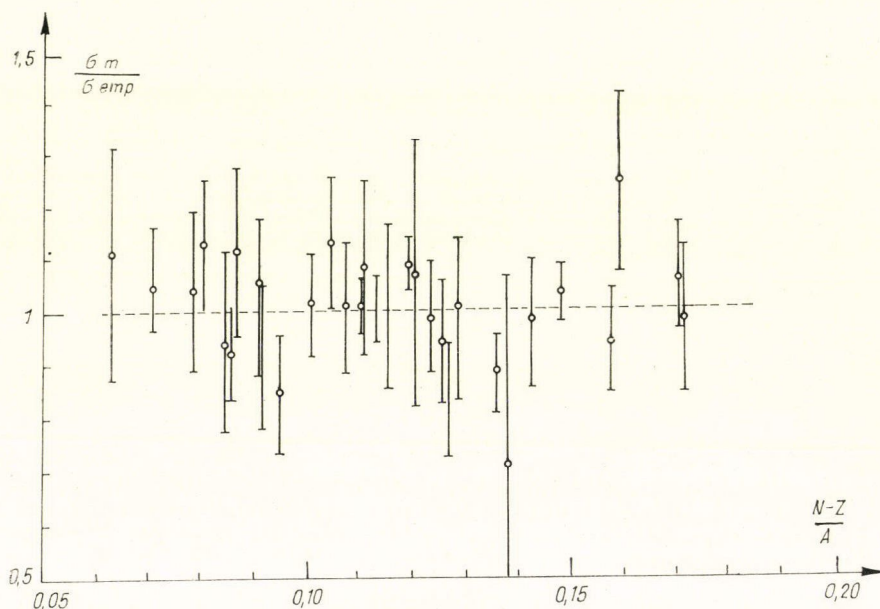
A felhasznált adatok többsége közvetlen mérési eredmény, néhány esetben a 14 MeV-en mért értékből extrapoláltunk. Az extrapolációt (2) alapján végeztük

$$T = \sqrt{\frac{E}{0,115A}}$$

empirikus összefüggés felhasználásával. E_k értékeit táblázatból vettük [Ho64]. Az illesztésnél a következő kifejezést alkalmaztuk:

$$\sigma_{n, 2n} = C_0 \left[1 + C_1 \exp \left(-C_2 \frac{N-Z}{A} \right) \right] \quad (4)$$

A meghatározott paraméterek: $C_0 = 2050$ mb; $C_1 = 0,061 (A^{1/3} + 1)^2$; $C_2 = 8,6$. Az illesztés jóságát $4 \leq N-Z \leq 21$ tartományba eső magokra az I. táblázat, illetve a 40. ábra szemlélteti.



40. ábra. A mért (σ_m) és a (4) egyenletből számított (σ_{emp}) hatáskeresztmetszet értékek hányadosa $\frac{N-Z}{A}$ függvényében

Megállapíthatjuk, hogy 14 MeV körüli energiákon mért $(n, 2n)$ hatáskeresztmetszetek a jelenlegi kísérleti adatok alapján a nívósűrűség héjefektusát nem mutatják. A kísérleti adatok, aktivációs módszerrel mért hatáskeresztmetszetek, páros neutronszámú magokra vonatkoznak, és így a párenergia esetleges héjefektusára sem lehet következtetni.

I. TÁBLÁZAT

A (4) egyenlet paramétereinek meghatározására felhasznált $(n, 2n)$ hatáskeresztmetszet mérési eredmények (σ_m) és a legjobb paraméterrel számított hatáskeresztmetszet-értékek

Target mag	$N-Z$	σ_m	$\sigma_{emp.}$	Ref.
^{55}Mn	0,091	750 ± 112	731	[Cs 67] M*
^{56}Fe	0,071	500 ± 40	470	[Bo 65] M
^{59}Co	0,085	570 ± 105	609	[Je 65] M
^{63}Cu	0,079	495 ± 74	478	[Cs 67] M
^{65}Cu	0,108	810 ± 120	805	[Cs 67] M
^{64}Zn	0,063	254 ± 50	232	[Bo 65] M
^{66}Zn	0,091	550 ± 83	598	[Cs 67] M
^{70}Zn	0,143	1065 ± 130	1092	[Cs 67] E*
^{69}Ga	0,101	690 ± 65	685	[Je 65] M
^{71}Ga	0,127	780 ± 100	941	[Cs 67] M
^{70}Ge	0,086	447 ± 45	486	[Wo 67] M
^{76}Ge	0,158	1095 ± 120	1169	[Wo 67] E
^{75}As	0,120	910 ± 40	838	[Je 65] M
^{74}Se	0,081	415 ± 44	368	[Ra 67] E
^{76}Se	0,105	745 ± 81	661	[Ra 67] E
^{79}Br	0,114	740 ± 45	738	[Mi 67] E
^{81}Br	0,136	835 ± 65	949	[Mi 67] E
^{85}Rb	0,129	830 ± 125	849	[Cs 67] M
^{87}Rb	0,149	1056 ± 53	1026	[Je 65] M
^{84}Sr	0,095	380 ± 50	452	[St 62] M
^{86}Sr	0,116	701 ± 110	699	[Bo 65] M
^{88}Sr	0,136	$215 \pm 24^{**}$	898	[St 62] M
^{89}Y	0,124	751 ± 80	764	[Ri 65] M
^{90}Zr	0,111	608 ± 30	605	[Bo 65] M
^{93}Nb	0,118	$384 \pm 60^{**}$	664	[Bo 65] E
^{92}Mo	0,087	280 ± 40	251	[Cs 67] M
^{100}Mo	0,160	1295 ± 180	1045	[Cu 67] E
^{103}Rh	0,126	642 ± 80	682	[Bo 65] E
^{107}Ag	0,121	630 ± 141	592	[Cu 67] E
^{109}Ag	0,138	553 ± 262	777	[Cu 67a] E
^{108}Cd	0,111	490 ± 75	453	[Yu 67] E
^{116}Cd	0,172	1044 ± 147	1066	[Yu 67] E
^{123}Sb	0,171	1090 ± 100	1025	[Je 65] M
^{127}J	0,165	900	951	[Je 65] M

* M: mérési adatok $E_n = Q + 3$ MeV energián, E: 14 MeV energián mért adatok $E_n = Q + 3$ MeV-re extrapolálva.

** A mérési eredmény csak az alapállapotra vezető reakció hatáskeresztmetszetét tartalmazza.

3. §. Direkt effektusok lehetősége az $(n, 2n)$ reakcióban

Gyorsneutronok detektálásának és energia mérésének ismert nehézségei miatt az $(n, 2n)$ reakcióról igen kevés kísérleti adat létezik. Az eddigi kísérletekben főleg a folyamat hatáskeresztmetszetét mérték. Erre az esetek túlnyomó részében az aktivációs módszert használják.

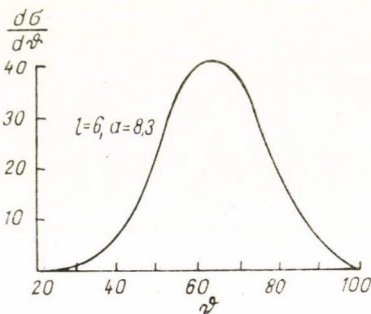
Az aktivációs módszer azon alapszik, hogy a két neutron eltávoztása után a visszamaradt magnak protonfeleslege van és ettől többnyire pozitron-bomlás útján

szabadul meg. Az eljárás a neutronok energia- és szögeloszlására, valamint a reakció mechanizmusára érzéketlen, ezekre semmiféle adatot nem szolgáltat.

Ashby és munkatársai [As58] a vizsgált reakciótargeteket hidrogéntartalmú folyadék szcintillátorral vették körül. Ebben a neutronok lefékeződtek és a folyadék szcintillátor anyagához kevert kadmiumba befogódtak. A lassú neutronok befogódásakor keletkezett gammák koincidenciáit regisztrálták. Ezzel a módszerrel bármely elem $(n, 2n)$ hatáskeresztmetszetét meg lehet határozni, azonban energia és szögkorrelációs mérésekre ez sem alkalmas.

A kompaund $(n, 2n)$ folyamat jellemzője 14 MeV bomlási energiánál, hogy a kilépő részecskék szögeloszlása a bombázó neutron irányához képest 90° -ra szimmetrikus, a két részecske független párolgása miatt iránykorreláció nincs közöttük. Az egy detektorral végzett mérések a párolgási spektrumok vizsgálatára azt mutatták, hogy a neutronok egy része, a spektrum nagy energiájú vége, előre irányul. Az előre irányuló neutronokról ezekben a kísérletekben nem lehet tudni, hogy $(n, 2n)$ vagy (n, n') magreakcióból származnak. Az (n, n') reakciónál tudjuk, hogy a direkt mechanizmus nagy szerepet játszik. Nyilvánvalóan felmerül az a gondolat, hogy az (n, n') kölcsönhatáshoz hasonlóan az $(n, 2n)$ reakció sem kizárólag kompaund folyamat. A direkt mechanizmus létezését az $(n, 2n)$ reakciónál az a tény is sugallja, hogy ez a folyamat más magreakciók mechanizmusának értelmezésében nagy szerepet játszik.

Komarov [Ko60] feltételezte, hogy az $(n, 2n)$ reakció pick-up mechanizmussal játszódhat le. Szerzők korábban foglalkoztak több részecskére vezető magreakciók vizsgálatával [Ko60a], [Ko60b]. Számításaik szerint, ha a részecskék között két



41. ábra. A két neutron súlypontjának szögeloszlása, $^{208}\text{Pb}(n, 2n)^{207}\text{Pb}$ 1.63 MeV nívójára, 14 MeV bombázó energiánál [Ko60]

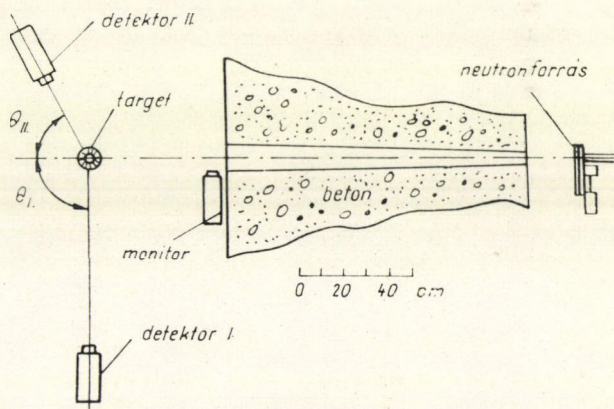
neutron van, erős maximumnak kell fellépnie az energia-eloszlásban, ami a neutronok végállapotbeli erős kölcsönhatásának a következménye. Ez sugallta a pick-up típusú reakciómechanizmus gondolatát. Eszerint két közel azonos energiájú, közel azonos irányú neutron lépne ki. Kiszámították a differenciális hatáskeresztmetszetet Born közelítésben. A kapott eloszlás alakja hasonló a szokásos Butler görbékhez. Példaként a képleteket $^9\text{Be}(n, 2n)^8\text{Be}$ és $^{208}\text{Pb}(n, 2n)^{207}\text{Pb}$ egy-egy nívójára alkalmazták 14 MeV bombázó energiánál. A 41. ábra a ^{207}Pb 1.63 MeV nívójának gerjesztésére kapott differenciális hatáske- resztmetszetet ábrázolja. Szerzők elgondolása szerint az erős szög- és energia-korreláció ki- emeli az ilyen típusú eseményeket a kompaund „háttérből” és lehetővé teszi a pick-up típusú reakciómechanizmus kísérleti kimutatását.

A végállapotbeli kölcsönhatás jelentőségét mutatják a $d(p, 2p)n$ és $d(n, p)2n$ reakciók tanulmányozására végzett kísérletek. A reakciók hatáske- resztmetszetében, a protonenergia függvényében maximumok jelennek meg a két proton, a két neutron, illetve a deuteron virtuális kötött állapotainak megfelelő protonenergiáknál [Il61], [Il63], [Vo65], [Av67]. Honecker és Grassler [Ho68] a $d(n, 2n)$ reakciót vizsgálta a két neutron koincidenciáinak regisztrálásával. A gondosan analizált kísérleti eredményekből az $n-n$ szórási hosszat értékelte ki.

A tisztán kompaund és a tisztán direkt mechanizmus mellett még a következő két esetet tételezhetjük fel: 1. Miután az első neutron kilép a közbelső magból, a visszamaradó mag, vagyis a gerjesztett targetmag gerjesztése nem esik a kontinuum tartományba. Így ez a mag „emlékezni fog” az első neutron emissziójára, ami arra vezet, hogy a két neutron kilépése korrelált lesz, de független a bombázó neutron irányától. 2. A bombázó neutron a targetmag egy vagy néhány nukleonjának direkt ütközéssel átadja energiájának egy részét és nagy valószínűséggel előre lép ki a magból. A targetmag által nyert energia eloszolhat a nukleonok között és kialakul a közbelső mag, amely neutron-emisszióval szabadul meg a gerjesztési energiától. A második neutron kilépése mind a bombázó, mind az első neutron haladási irányától független lesz.

A szögeloszlás összetevői az előbbieik alapján összefoglalva a következők lehetnek:

- Tiszta kompaund mechanizmus. A két neutron kilépési iránya és energiája között nincsenek korrelációk, eltekintve a 90° -os szimmetriától, valamint a bombázó energia és a kilépő neutronok maximális energiája közötti összefüggéstől.
- Direkt-kompaund mechanizmus. A kilépő neutronok iránya és a bombázó neutronok iránya között van korreláció. A két neutron között nincs.
- Kompaund-direkt mechanizmus. A kilépő neutronok a beeső neutrontól független irányba lépnek ki, de egymáshoz képest szögben és esetleg energiában korrelálva.
- Tiszta direkt mechanizmus. A kilépő neutronok előreirányuló szögeloszlással rendelkeznek és a két neutron között szög és energia korreláció van.

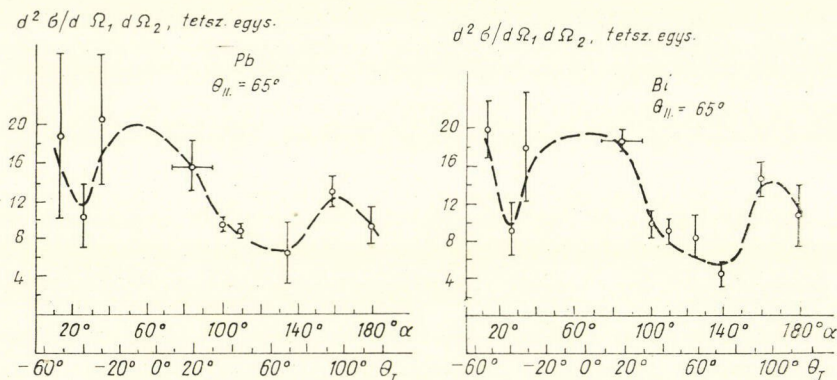


42. ábra. Kísérleti elrendezés az $(n, 2n)$ neutronok szögeloszlásának mérése [Vo69]

A repülési idő módszerrel 14 MeV energián sok mérést végeztek, de ezek alapján az $(n, 2n)$ reakció mechanizmusára nem lehet következtetni. Csak a két neutron koincideneciájának detektálása útján mért szög- és energiaeloszlások vizsgálata vihet közelebb a reakció lefolyásának megismeréséhez.

Ilyen kísérletet első ízben a szerző és munkatársai végeztek 1963-ban [A63]. Ezekről a vizsgálatokról az V. fejezetben számolunk be.

Az $(n, 2n)$ reakció mechanizmusának tanulmányozására végzett szögeloszlás mérésről Sztrizsak és munkatársai [Vo69] számoltak be 1969-ben. Kísérleti elrendezésük a 42. ábrán látható. A két neutron-detektor közötti koincidenциákat regisztrálták. A mérést Pb és Bi magokon végezték el. A kapott szögeloszlások a 43. ábrán láthatók. Az egyik detektort fix helyzetben (65°) tartották és a másik detektor helyzetét változtatták. A kapott szögeloszlások határozott, az izotróptól eltérő jellegű mutatnak. A szerzők következtetései szerint a végállapotbeli kölcsönhatás a reakcióban jelentős szerepet játszik. Ez felelős a megfigyelt szögeloszlás előre irányuló jellegéért, valamint a kis relatív szögeknél jelentkező maximumért.



43. ábra. Az $(n, 2n)$ neutronok szögeloszlása, θ_1 a mozgattott detektor, $\theta_{II} = 65^\circ$ a fix helyzetű detektor szöge a beeső neutronok irányához képest, α a két detektor közötti szög [Vo69]

Az V. fejezetben ismertetett kísérleti berendezéssel 1963-ban mi is kísérletet tettünk a szögeloszlás meghatározására. A 43. ábrán látható eloszlásokhoz hasonlóan azt tapasztaltuk, hogy amikor a két detektor egymáshoz közel került, a koincidenциák száma igen erősen megnőtt. Az elvégzett kontroll méréseink azonban azt mutatták, hogy ebben nagy, esetleg kizárólagos szerepet játszik az egyik detektorból a másikba való átszórás. Ezen tapasztalataink alapján az a meggyőződésünk, hogy a 43. ábrán látható szögeloszlásokban az átszórás nagy szerepet játszhat és ezért ezeket a reakciómechanizmus vonatkozásában nem lehet figyelmebe venni.

V. Direkt folyamatok részesedésének kísérleti vizsgálata az $(n, 2n)$ reakcióban

1. §. A mérési módszer és a regisztráló berendezés

Első lépésként azt a célt tűztük ki, hogy megmérjük az $(n, 2n)$ reakció kompaund részének hatáskeresztmetszetét. Ezt összevetve a más módszerekkel mért teljes hatáskeresztmetszet értékkel, tájékozódni kívántunk a neutronok közti korrelációk vár-

ható mértékéről. Olyan mérési módszert alkalmaztunk, amely az aktivációs módszerrel mért $(n, 2n)$ hatáskeresztmetszet értéket adja akkor, ha az $(n, 2n)$ reakcióban a neutronok között nem lépnek fel korrelációk. Egyébként ennél kisebb értéket szolgáltat, amely a korrelálatlan $(n, 2n)$ események hatáskeresztmetszetével egyenlő [A63].

A mérési elrendezés a 44. ábrán, a regisztráló elektronika blokk-sémája a 45. ábrán látható. A neutronokat egy-egy szcintillációs detektorral regisztráltuk. Ugyancsak regisztráltuk a ${}^3\text{H}(d, n){}^4\text{He}$ reakcióban keletkezett alfa-részecskét is. Az $(n, 2n)$ események kiválasztása az alfa-detektor és a neutrontektorok közé elhelyezett koincidenziakörökkel történt. A bejövő neutronok irányát az alfa-detektor jelöli ki. A regisztrált mennyiségek a neutrontektoroknak az alfadetektorral való késleltetett koincidenziái (N_A, N_B) és az utóbbiak közti koincidenziák száma (N_k), valamint az alfadetektor beütésszáma (N_α).

Az α detektor a bejövő nyaláb irányához 150° -os szögben, 130 mm távolságtól elhelyezett, 0,1 mm vastagságú 43 mm átmérőjű plastik szcintillátorral ellátott RCA 6810/A elektronsokszorozó volt. A trícium target effektív átmérője 2 mm volt.

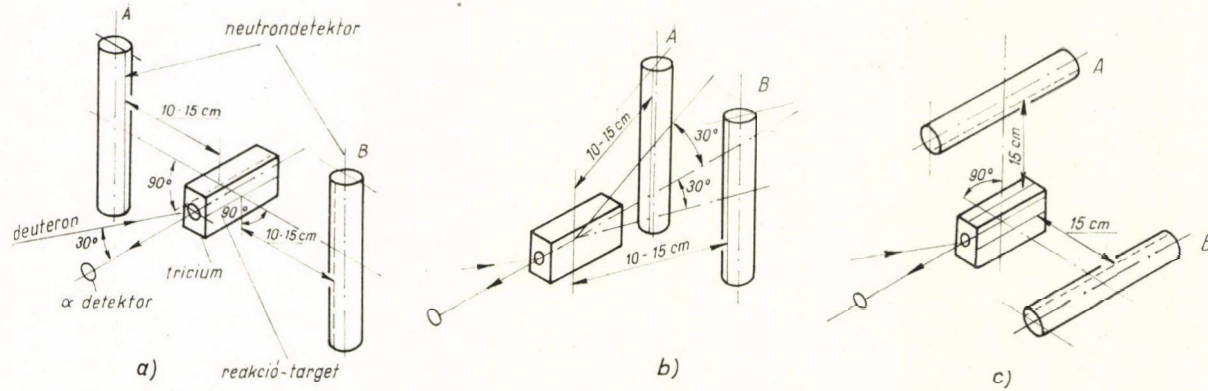
A neutronhozam a mérések folyamán 4π térszögben 10^6 neutron/sec volt, a neutronenergia 14,7 MeV. A spektrum alakjából extrapolálva a keletkező alfának kb. 98%-át számoltuk meg. Az alfa-sugarak útjába vékony átlátszó plexi réteget téve, a gyorsítót rendes körülmények között üzemeltetve, az alfa-detektor beütésszáma a szokásosnak 1,5%-a volt.

A neutronokat két, egyenként 50 mm átmérőjű, 230 mm hosszú, KFKI-ben készült plastik foszforral és RCA 6810/A elektronsokszorozókkal detektáltuk.

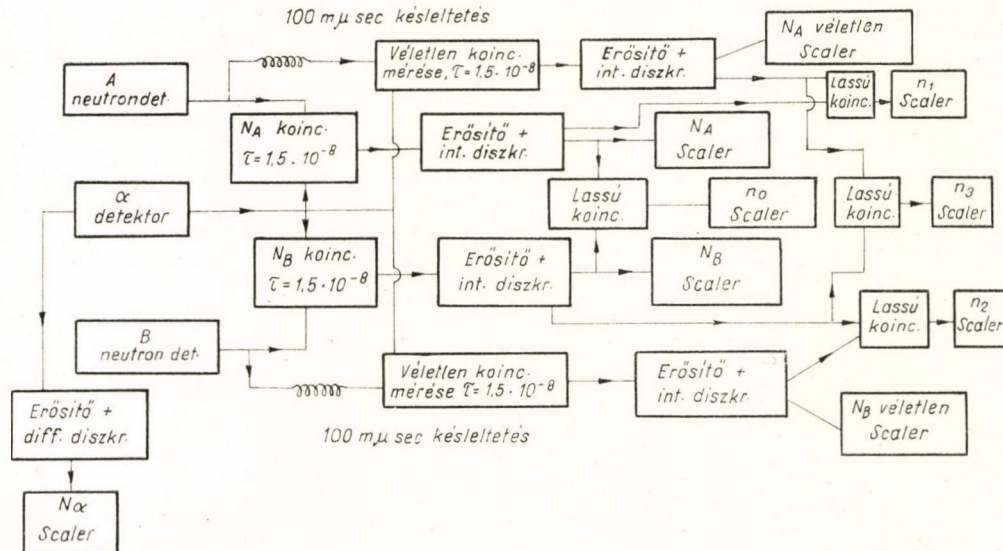
A reakciótargetek közvetlenül ráilleszkedtek a trícium target hátlapjára. Miután az alfa-detektorral való koincidenzia miatt úgyis csak azokat a neutronokat detektáljuk, melyek a szórótarget irányába léptek ki, ez az elrendezés sokkal előnyösebbnek bizonyult annál, mint amikor a neutrontektorokat és a reakciótargetet a gyorsítóból messzebb helyeztük el és az egész neutronforrást 40 cm ólom és 30 cm paraffin árnyékolással vettük körül minden irányban a reakciótarget felé vezető kis nyílás kivételével, és a direkt nyaláb útjába a detektorok és a neutronforrás közé még külön 40 cm paraffint helyeztünk el.

A neutron detektorok érzékenységi küszöbét ${}^{22}\text{Na}$, ${}^{60}\text{Co}$ és ${}^{137}\text{Cs}$ preparátumok gamma-spektrumaiból állapítottuk meg. Ezek alapján a koincidenziakör megindításához legfeljebb 40 keV elektronenergia kellett, ami ~ 100 keV protonenergiának felel meg. Az alfa-ág érzékenységét a gyors ágba úgy állítottuk be, hogy a gyorskoincidenzia minden alfából származó jelet számoljon, de a zaj ne tudja kivezérelni. Ekkor új targetnél az alfa-monitorkör és az alfát számoló gyors koincidenzia ugyanannyit számolt. Használat közben a beépülő deutériumból származó protonok miatt a gyorskoincidenzia beütésszáma valamivel megnőtt, azonban ez csak véletlen koincidenziákat okozhatott, amit külön vettünk korrekcióba.

A késleltetéseket úgy állítottuk be, hogy csak akkor kaphattunk koincidenziákat, ha a neutron-detektorok jele 5–35 m μsec -mal a magreakció időpontja után keletkezett. Ilyen módon az $(n, 2n\gamma)$ és $(n, n'\gamma)$ reakcióban keletkező gammák és a szórt neutronok egyáltalán nem adhattak szisztematikus koincidenziát. Ha feltételezzük, hogy a kilépő neutronok energiaeloszlása $Ee^{-E/T}$ alakú, ahol T a maghőmérséklet 0,75–1,2 MeV közti érték, akkor a neutronoknak 90–98%-a a koincidenziák érzékenységi ideje alatt esik rá a detektorokra. A két gyorskoincidenzia jeleit erősítés és amplitúdó-diszkriminálás után egy lassú, $2 \cdot 10^{-6}$ sec felbontóképességű koinci-



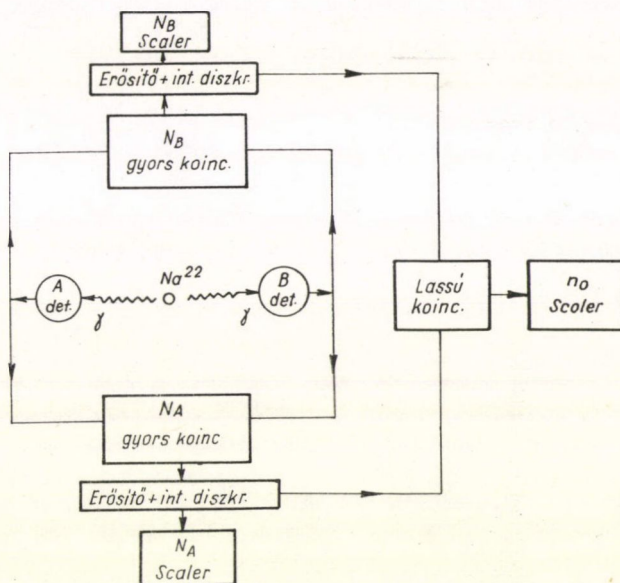
44. ábra. Kísérleti elrendezés a direkt folyamatok részesedésének vizsgálatánál



45. ábra. A regisztráló berendezés bloksémája

denciakörre vittük. Ez a fokozat csak akkor szólalt meg, ha mindkét neutron detektor az alfa-detektor jele után a késleltetések által kijelölt időpontban adott jelet.

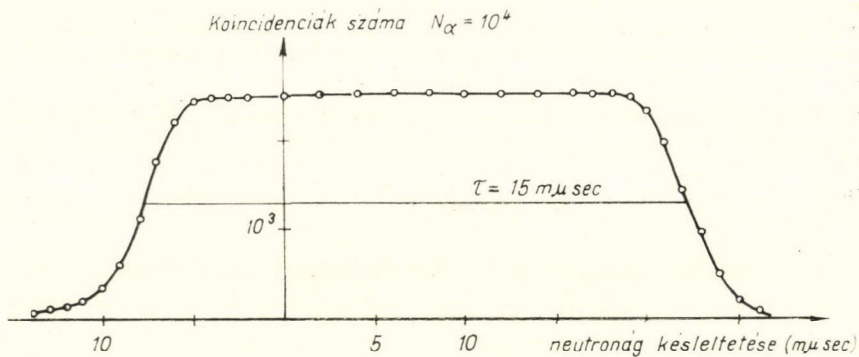
Bár kiértékelési módszerünk olyan volt, hogy a neutron detektorok kisebb instabilitásai automatikusan kiestek, mégis naponta kontrolláltuk őket. A két detektor közé meghatározott helyre egy ^{22}Na preparátumot helyeztünk el. A detektorok jelét egy időben rávittük mindkét gyorskoincidenziára és ezeknek jeleit a lassú koincidenzába vittük (46. ábra). Mindhárom koincidenzák kör jeleit számoltuk.



46. ábra. A stabilitás ellenőrzésére szolgáló mérési elrendezés

A beütésszámok a 3 hónapos mérési idő folyamán 5%-on belül reprodukálhatóak voltak. Az alfa detektor beütésszámában — mivel a zaj igen élesen különvált a jelektől — kisebb instabilitások nem okoztak változást, azonban ennek ellenére mindennap felvettük az alfa-spektrumot. Ugyancsak naponta kontrolláltuk a koincidenzá körök felbontását és a szükséges késleltetéseket. Ehhez az egyes neutron detektorokat a szórótárgy helyére tettük és felvettük a 14,7 MeV-es neutronok és a hozzájuk tartozó alfa-részecskék koincidenzáinak számát a késleltetés függvényében (47. ábra). A késleltetéseket úgy állítottuk be, hogy a két neutron-alfa koincidenzá kör 5—35 μsec -mal a primér neutronok beérkezése után adhatott szisztematikus koincidenzá. A koincidenzá kör felbontásának ingadozása a mérési idő folyamán $\sim 1 \mu\text{sec}$ volt.

Mivel a neutron detektor térszöge jóval nagyobb az alfa-detektor térszögénél, ez az eljárás egyben megadta a neutron detektorok hatásfokát, ε -t 14,7 MeV-es neutronokra. A koincidenzák száma ugyanis $N_k = N_0 \varepsilon \omega_\alpha = N_\alpha \varepsilon$, ahol N_0 a neutron-intenzitás egységnyi térszögbe, ω_α az alfa-detektor térszöge, N_α a beütésszáma.



47. ábra. A gyorskoincidenencia kör felbontási görbéje, amely egyben a neutrondetektor hatásfokát is megadja

A használt neutron detektorok hatásfoka $\varepsilon \approx 0,26$. Az átlagos hatásfok azonban ettől eltérhet, mivel ennél az elrendezésnél a neutronok pontosan a kristály közepén mennek keresztül.

2. §. A kiértékelési eljárás

Kiértékelési eljárásunk azon alapszik, hogy a választott anyagoknál (Pb, Bi) 90° -os szögbe csak $(n, 2n)$ reakcióból származó neutronok lépnek ki. Ez a feltevés jogos, mert nehéz atommagoknál az $(n, 2n)$ hatáskeresztmetszet 14 MeV-nél egyenlő a reakció hatáskeresztmetszettel [Ro57], [As58], [Be58]. Tegyük fel továbbá, hogy az $(n, 2n)$ reakcióban a neutronok egymástól függetlenül párolognak. Szögeloszlásukról csak annyit tegyük fel, hogy hengerszimmetrikus.

A számítások áttekinthetősége érdekében vezessük be a következő jelöléseket:

N_0	a másodpercenkénti neutronhozam egységnyi térszögbe;
ω_α	az alfa-detektor térszöge a neutronforrásból;
ε_α	az alfa-detektor hatásfoka;
$N_\alpha = N_0 \omega_\alpha \varepsilon_\alpha$	az alfa-detektor másodpercenkénti beütésszáma;
p	annak valószínűsége, hogy a targetben létrejön egy $(n, 2n)$ reakció;
P	annak valószínűsége, hogy a targetben (n, n') , vagy $(n, 2n)$ reakció következzen be;
$\varepsilon_A, \varepsilon_B$	a neutron átlagos hatásfoka az (n, n') reakcióban keletkezett neutronokra;
$\varepsilon'_A, \varepsilon'_B$	a neutron detektorok átlagos hatásfoka az $(n, 2n)$ reakcióban először elpárolgó neutronokra;
$\varepsilon''_A, \varepsilon''_B$	a neutron detektorok átlagos hatásfoka az $(n, 2n)$ reakcióban másodszor elpárolgó neutronokra;
ω_A, ω_B	annak valószínűsége, hogy (n, n') reakció után a neutronok a detektorok irányába lépjenek ki;
$\omega'_A, \omega''_A, \omega'_B, \omega''_B$	annak valószínűsége, hogy az $(n, 2n)$ reakció első, illetve második neutronja a detektor irányába lépjen ki;

f annak átlagos valószínűsége, hogy egy szórt neutron, amely elindult a neutron detektor irányába, kijusson a szórótárból;
 F annak valószínűsége, hogy az $(n, 2n)$ reakcióban mindkét neutron, amely elindult a detektor irányába, kijusson a szórótárból.

Ha a szórótárból effektív vastagsága, d sokkal kisebb a neutronok szabad úthosszánál, λ -nál (ez csak kevésbé függ az energiától), akkor

$$f \approx \frac{1}{d} \int_0^d e^{-\frac{x}{\lambda}} dx = \frac{\lambda}{d} \left(1 - e^{-\frac{d}{\lambda}}\right) \approx 1 - \frac{d}{2\lambda}$$

és

$$F \approx \frac{1}{d} \int_0^d e^{-\frac{x}{\lambda}} \cdot e^{-\frac{d-x}{\lambda}} dx = e^{-\frac{d}{\lambda}} \approx 1 - \frac{d}{\lambda} \approx f^2$$

$\Omega_A, \Omega'_A, \Omega_B, \Omega'_B, \Omega''_A, \Omega''_B$ annak valószínűsége, hogy egy (n, n') , első, illetve második $(n, 2n)$ neutron, amely a reakció után nem a detektorok irányába indul el, újabb ütközések után a neutron detektor felé szóródjon.

$$\bar{\omega}_i = \omega_i + \Omega_i \approx \omega_i; \quad \bar{\omega}'_i = \omega'_i + \Omega'_i \approx \omega'_i; \quad \bar{\omega}''_i = \omega''_i + \Omega''_i \approx \omega''_i \quad (i = A, B)$$

N_i a másodpercenkénti szisztematikus neutron-alfa koincidenziák száma az A , ill. B koincidenziakörben:

$$N_i = N_\alpha \{p[\varepsilon'_i \bar{\omega}'_i + (1 - \varepsilon'_i \bar{\omega}'_i) \varepsilon''_i \bar{\omega}''_i] + (P - p) \varepsilon_i \bar{\omega}_i\} f$$

N_k a másodpercenkénti szisztematikus neutron-alfa koincidenziák száma:

$$N_k = N_\alpha p [\varepsilon'_A \bar{\omega}'_A \varepsilon''_B \bar{\omega}''_B + \varepsilon'_B \bar{\omega}'_B \varepsilon''_A \bar{\omega}''_A] \cdot F$$

Itt felhasználtuk, hogy a második neutron kilépésének iránya független az első kilépésének irányától.

Képezzük a $\bar{p} = \frac{N_A \cdot N_B}{2N_K \cdot N_\alpha}$ hányadost

$$\bar{p} = \frac{[p(\varepsilon'_A \bar{\omega}'_A + \varepsilon''_A \bar{\omega}''_A - \varepsilon'_A \bar{\omega}'_A \varepsilon''_A \bar{\omega}''_A f) + (P - p) \varepsilon_A \bar{\omega}_A][u \cdot a \cdot B_{\text{indexre}}] f^2}{2p[\varepsilon'_A \bar{\omega}'_A \varepsilon''_B \bar{\omega}''_B + \varepsilon'_B \bar{\omega}'_B \varepsilon''_A \bar{\omega}''_A] F} \quad (1)$$

Az (1) kifejezést egyszerűbb alakra hozzuk. Bizmutnál és ólomnál $P \approx p$. Kis szórótárból $f^2 \approx F$ és tételezzük fel, hogy

$$\varepsilon'_i \bar{\omega}'_i = \varepsilon''_i \bar{\omega}''_i.$$

Ez a feltevés jogosult, mert bár a két neutron energiaspektruma kissé különbözhet, de a detektorok átlagos érzékenysége nem függ erősen az energiaspektrum alakjától, és kompaund mechanizmusnál a neutronok függetlenek egymástól és szögeloszlásuk megegyezik. Ekkor (1) a következő alakot veszi fel

$$\bar{p} = p \frac{(2 - \varepsilon'_A \bar{\omega}'_A f)(2 - \varepsilon'_B \bar{\omega}'_B f)}{4} \quad (2)$$

és mivel $\varepsilon'_i \bar{\omega}'_i f \ll 1$

$$\bar{p} = \frac{N_A \cdot N_B}{2N_\alpha \cdot N_k} = p \quad (3)$$

Látható, hogy p meghatározásához ennél a módszernél nincs szükségünk a detektorok hatásfokára, amit csak nehezen és pontatlanul lehet megállapítani. A (2)-ben szereplő $\varepsilon_i \omega_i f_i$ még $\varepsilon_i = 0,4$ mellett is $\sim 0,02$, így elhanyagolható. p -ból az $(n, 2n)$ hatáskeresztmetszetet, $\sigma(n, 2n)$ -t a következő összefüggésből kapjuk meg:

$$p = \int_0^L \Sigma(n, 2n) e^{-\frac{x}{\lambda_{att}}} dx = \frac{\sigma(n, 2n)}{\sigma_{att}} \left(1 - e^{-\frac{L}{\lambda_{att}}}\right) \quad (4)$$

ahol L a szórótárgy hossza, λ_{att} pedig a nyaláb gyengülését meghatározó attenuációs szabad úthossz. A rugalmas szórás erősen előreirányuló jellege miatt várható, hogy $\lambda_{att} \approx \lambda_r$ (λ_r a reakció szabad úthossza). Különböző hosszúságú targetekkel végzett kísérletek ezt a várakozást igazolták. Ennek ellenére $\sigma(n, 2n)$ meghatározására olyan rövid (1 cm hosszú) targetet használtunk, amelyre $L \ll \lambda_{att}$ és így

$$p = \frac{\sigma(n, 2n)}{\sigma_{att}} \left(1 - e^{-\frac{L}{\lambda_{att}}}\right) = \Sigma(n, 2n)L \quad (5)$$

Annak érdekében, hogy a kompaund mechanizmuson keresztül lejátszódó $(n, 2n)$ reakció hatáskeresztmetszetét $\sigma(n, 2n)_c$ -t kapjuk meg, a detektorokat a 44/a ábrán látható módon egymással szemben, a beeső neutron irányára merőlegesen helyeztük el. Feltételeztük, hogy ebben az elrendezésben direkt folyamatban keletkező neutronok nem juthattak egyszerre mindkét detektorba, azaz N_k -hoz nem adnak járulékot.

A továbbiakban megmutatjuk, hogy a mért értékekből meghatározott mennyiség vagy $\sigma(n, 2n)_c$, vagy annak egy felső határa. Így a más módszerekkel mért teljes $(n, 2n)$ hatáskeresztmetszet és az általunk mért érték különbsége a direkt folyamatok hatáskeresztmetszetével, $\sigma(n, 2n)_d$ -vel egyenlő, vagy annak alsó becslése.

- A) $P \neq p$ a direkt (n, n') miatt. Az (n, n') direkt folyamat erősen előre irányul és az (n, n') neutronok nem juthatnak a detektorba, így $\bar{p} = p$.
- B) $P \neq p$ és az (n, n') folyamat nem irányul előre. Ekkor (1) számlálója nő, így $\bar{p} > p$, a direkt $(n, 2n)$ folyamat hatáskeresztmetszetét alábecsültük. Ugyanez áll fenn, ha az $(n, 2n)$ direkt folyamatból származó neutronok valamelyike bejut az egyik detektorba. Ez azt is jelenti, hogy ha a két neutron közt szögkorreláció áll fenn, akkor $\bar{p} > p$, kivéve azt az esetet, ha ez a bejövő irányra merőleges 180° -os korreláció, ami elképzelhetetlennek tűnik.
- C) Belátható, hogy $f^2 \cong F$, így ha a targetvastagság befolyásolná az eredményt, akkor $\bar{p} > p$. Ezért itt is legfeljebb alábecsültük $\sigma(n, 2n)_d$ -t.
- D) $\varepsilon'_i \bar{\omega}'_i \neq \varepsilon''_i \bar{\omega}''_i$ esetén egyszerűen kimutatható, hogy $\bar{p} > p$, így $\sigma(n, 2n)_d$ -t így is alábecsültük.
- E) Ha a kilépő két neutron szögeloszlása különböző, tehát

$\bar{\omega}'_i$ és $\bar{\omega}''_i = a(\bar{\omega}'_i)$, szimmetriakokkból $a(\bar{\omega}'_A) = a(\bar{\omega}'_B) = a(\bar{\omega})$, akkor

$$N_i = N_\alpha p \varepsilon'_i \bar{\omega}'_i [1 + a(\bar{\omega})] f$$

$$N_k = 2N_\alpha p \varepsilon'_A \bar{\omega}'_A \varepsilon'_B \bar{\omega}_B a(\bar{\omega}) f^2$$

és

$$\bar{p} = \frac{[1 + a(\bar{w})]^2}{4a(\bar{w})} p \cong p$$

így $\sigma(n, 2n)_d$ -t ismét alábecsültük.

- F) Könnyen belátható, hogy ha az $(n, 2n)$ folyamat mellett valamilyen más magreakció is adhatna szisztematikus koincidenenciát, akkor ennek valószínűségét még hozzámérjük az $(n, 2n)$ reakció valószínűségéhez, és ezért $\bar{p} > p$.

Látjuk tehát, ha a tett és igen valószínűnek látszó feltevéseink közül valamelyik nem teljesülne, akkor ez $\sigma(n, 2n)_d$ növekedésére vezetne.

3. §. Véletlen koincidenenciák

A mért koincidenenciákból a kiértékelés előtt ki kell vonnunk a véletlen koincidenenciákat és a tríciumot tartó fémlemezben történő magreakciókból származó koincidenenciákat. (N_k -ban például szignifikánsan kimutatható volt, amikor egy 2 mm-es wolfram hátlapú trícium target helyett egy 0,2 mm-es molibdén hátlapú targetet helyeztünk el.)

Méréseink szerint N_A -ban és N_B -ben a véletlen koincidenenciák legnagyobb részét a tríciumból közvetlenül a detektorba jutó neutronok okozzák. A véletlen koincidenenciák száma ezért ezekben a fokozatokban nem függ a reakciótarget jelenlététől és így

$$\begin{aligned} N_i &= (N_{i, \text{targettel}} - N_{i, \text{targettel, véletlen}}) - (N_{i, \text{target nélkül}} - N_{i, \text{target nélkül, véletlen}}) = \\ &= N_{i, \text{targettel}} - N_{i, \text{target nélkül}} \quad (i = A, B) \end{aligned}$$

A korrekció N_i -ben kb. 15–30% volt, amelynek mintegy kétharmada véletlen koincidenenciából adódott, a többi pedig a tartószerkezetben létrejövő magreakciókból.

N_k -ra nézve már nem igaz, hogy target nélkül a véletlen koincidenenciák száma ugyanannyi, mint amikor target is jelen van. Erre egy egyszerű példa: N_A szisztematikus $n-\alpha$ koincidenenciákat ad és véletlenül ugyanakkor érkezik be a B detektorba egy 14,7 MeV-es neutron. A szisztematikus koincidenenciák meghatározásához osszuk fel a lassú koincidenencia megszólalását a következő egymást kizáró teljes rendszert alkotó eseményekre:

A koinc.	Sz				V			
	Sz		V		Sz		V	
B koinc.	Sz		V		Sz		V	
A két jelhez tartozó	azonos	más	azonos	más	azonos	más	azonos	más
A neutrondetektorok koincidenenciája	Sz V	Sz V	Sz V	Sz V	Sz V	Sz V	Sz V	Sz V
Az adott típusú hármas koincidenenciák száma/sec	n_a 0	0 n_b	0 n_c	0 n_d	0 n_e	0 n_f	n_{g1} n_{g2}	0 n_h

Sz: szisztematikus, V: véletlen

Normális beállításban a szekundumonként mért koincidenciaszám n_0 :

$$n_0 = n_a + n_b + n_c + n_d + n_e + n_f + n_{g2} + n_h + n_{g1}$$

Minden alkalommal oly módon is mértünk, hogy először az A , majd a B detektor jeleit annyira megkésleltettük, hogy N_A -ban, illetve N_B -ben csak véletlen koincidencia lehetett. Az N_k -ban mért szekundumonkénti beütésszám n_1 , illetve n_2 .

$$n_1 = n_e + n_f + n_{g2} + n_h$$

$$n_2 = n_c + n_d + n_{g2} + n_h$$

Ezzel egyidejűleg úgy is mértünk, hogy a két neutrontetektor időben egyszerre szólalt meg, de az alfa-detektor jelét ehhez az időhöz képest úgy megkésleltettük, hogy N_A -ban és N_B -ben csak véletlen koincidencia lehetett. Az N_k -ban így kapott koincidenciaszámot jelöljük n_3 -mal, azt a koincidenciaszámot, amit akkor kaptunk, amikor a két neutrontetektor nem egy időben érzékeny és mindegyik csak véletlenül adhatott koincidenciát az alfa-detektorral (ezek a teljesen véletlen koincidenciák) n_4 -gyel.

$$n_3 = n_{g1} + n_{g2} + n_h$$

$$n_4 = n_{g2} + n_h$$

A mérési adatokból képezzük a következő mennyiséget

$$n_0 - n_1 - n_2 - n_3 + 2n_4 = n_a + n_b.$$

Az N_A és N_B koincidenciakörök szisztematikus koincidenciáival és N_k felbontási idejével, τ -val n_b kifejezhető:

$$n_b = 2\tau(N_{A, \text{mért}} - N_{A, \text{véletlen}})(N_{B, \text{mért}} - N_{B, \text{véletlen}})$$

$$N_{A, \text{véletlen}} - t \quad \text{és} \quad N_{B, \text{véletlen}} - t \quad n_1, n_3, n_4 \quad \text{illetve} \quad n_2, n_3, n_4$$

mérésekor határozzuk meg. Így a szisztematikus koincidenciák száma:

$$n_a = n_0 - n_1 - n_2 - n_3 + 2n_4 - 2\tau(N_{A, \text{mért}} - N_{A, \text{véletlen}})(N_{B, \text{mért}} - N_{B, \text{véletlen}})$$

A reakciótargetból származó koincidenciák száma, amit (3)-ba be kell helyettesítenünk

$$N_k = n_{a, \text{targettel}} - n_{a, \text{target nélkül}}$$

A korrekciók, melyeknek kb. felét a véletlen koincidenciák okozták, n_0 értékét 25–30%-kal csökkentették. p értéke az összes korrekciók (véletlen és idegen anyagokból adódó szisztematikus koincidenciák) elvégzése után kb. 15–25%-kal csökkent.

Az intenzitás növelésével a véletlen koincidenciák száma sokkal gyorsabban nő, mint a szisztematikus koincidenciáké. Ezért ha adott mérési idő alatt maximális pontosságot akarunk elérni, akkor ehhez egy meghatározott intenzitás tartozik. Az optimális intenzitás a mi esetünkben a teljes 4π térszögbe $\sim 10^6$ neutron/sec-nak adódott.

4. §. Az elvégzett mérések

Minden egyes esetben mértük N_a -t, N_A -t, N_B -t és N_k -t reakciótargettel és anélkül. Késleltetésekkel folyamatosan mértük a véletlen koincidenenciákat is és ezek figyelembevételével számoltuk ki p -t. A különböző geometriai elrendezésekben 10–30 alkalommal végeztünk mérést. A hibákat az átlagtól való eltérés alapján empirikusan állapítottuk meg.

Bizmuton a következő méréseket végeztük el:

a) 1×1 -es henger alakú reakciótargettel mérve $\sigma(n, 2n)_c = 1,95 \pm 0,08$ barn. A $\sigma(n, 2n)$ bizmutnál $2,3 \pm 0,3$ [Ro57], illetve $2,60 \pm 0,19$ barn [As58].

b) A különböző hosszúságú targetekkel mért értékek az előzővel megegyeztek, ha a kiértékelésnél $\sigma_p = 2,5$ barn értéket használtunk.

c) Annak ellenőrzésére, hogy a kétszeres szórás nem befolyásolja az eredményt, azonos hosszúságú, de különböző keresztmetszetű targeteken, valamint különböző target-detektor távolságoknál is végeztünk méréseket. A kapott σ értékek kb. 3%-on belül megegyeztek egymással.

d) Ha a kiértékelésnél tett feltevések bármelyike nem teljesülne, akkor ez a korrelált folyamatok járulékának alábecsülésére vezetne. Az egyetlen zavaró effektus, amely \bar{p} értékét csökkenthetné, az lehet, hogy az egyik detektorból egy neutron, amely ott szisztematikus koincidenenciát okozott, átszóródott a másik detektorba, és ott is szisztematikus koincidenenciát ad. Ez az effektus N_k -t növeli, míg N_A és N_B lényegében változatlan marad.

Az átszórás az adott geometriai elrendezésben elég valószínűtlennek tűnik, mivel ehhez a neutronoknak 180° -ba kellett volna szóródniuk. Ez csak többszöri ütközéssel lehetséges. Ha viszont rugalmatlan ütközéssel gerjesztett szénatomból származó gamma szóllaltatja meg a másik detektort, akkor a meglökött szénatom által kiváltott fény nem éri el a berendezés megindításához szükséges szintet. Ezen megfontolások ellenére kísérletileg is gondosan meggyőződünk arról, hogy ez az átszórás effektus valóban nem lép fel.

Úgy tűnik, hogy ha a detektorokat messzebb tesszük a tagettől, akkor az átszórás koincidenenciák száma — ha egyáltalán van ilyen — csökkenni fog, ezért nagyobb p -t kapunk. Belátható azonban, hogy az általunk használt osztásos eljárásnál ezzel a módszerrel nem lehet megkülönböztetni az átszórás koincidenenciákat az $(n, 2n)$ reakcióból származó valódi koincidenenciáktól.

Szénben az $(n, 2n)$ reakció küszöbenergiája 20 MeV. Ezért N_k értéke széntargettel vagy anélkül ugyanaz kellene legyen. A mérések alapján a széntargettel mért N_k mintegy 10%-kal több volt. Ennek az az oka, hogy a koincidenenciakör megszólalási valószínűsége a felbontási időn kívül nem esik le azonnal zérusra, ezért bár kis valószínűséggel, de $(n, n'\gamma)$ koincidenenciákat is mértünk. Ezek bizmut és ólom targetnél a beütésnek csak kis hányadát tették ki — és mint belátható, különben is csak növelnék \bar{p} -t — így a tényleges mérésnél nem okoztak zavart. Az átszórás biztos kizárására azonban ez a módszer sem volt alkalmas.

A detektorok átlagos hatásfokának ismeretében a megszólalási valószínűségük kiszámítható. Így p N_k -ból, és mivel 90° -ba feltevésünk szerint csak $(n, 2n)$ neutronok lépnek ki, N_A -ból és N_B -ből is közvetlen meghatározható. Ez az eljárás a hatásfok miatt természetesen sokkal pontatlanabb, mint az osztásos módszer, de az átszórás ellenőrzésére megfelelő. Izooktánon (C_8H_{18}) való szórással megállapítottuk a detektor hatásfokának energiafüggését [A64] és idő-amplitúdó konverterrel egy detektor-

ral felvettük a bizmutból 90° -os szögbe kilépő neutronok repülési-idő spektrumát. Ebből megállapítottuk a detektor átlagos hatásfokát az $(n, 2n)$ neutronokra, ami — mint várható volt — elég érzéketlen a spektrum alakjára. N_A és N_B -ből, valamint N_k -ből is kiszámítottuk p -t, ami $0,255 \pm 0,023$, valamint $0,252 \pm 0,046$ -nak adódott, ahol a hibák a megszólalási valószínűség pontatlanságából származnak. Az osztásos módszerrel kapott és hatásfoktól független p $0,267 \pm 0,006$ volt, míg az aktivációs módszerrel mért totális hatáskeresztmetszet alapján $0,34$ -et kellett volna kapni. Amennyiben átszórás miatt mértünk volna kisebb hatáskeresztmetszetet, úgy N_A és N_B -ből a $0,34$ -es, míg N_k -ből egy ennél nagyobb p -t kellett volna kapnunk, mivel az „átszórási koincidenenciákat” is számoltuk volna. Ez nem következett be, így elfogadtuk, hogy átszórás nem lépett fel, az általunk mért hatáskeresztmetszet valóban a korrelálatlan hatáskeresztmetszet felső korlátja.

e) Megváltottuk az egyik koincidenenciakör felbontását úgy, hogy — különböző hőmérsékletű párolgási spektrumot feltételezve az első és második neutronra — ε'_A ne legyen egyenlő ε''_A -vel. Azt találtuk, hogy \bar{p} gyakorlatilag nem változott. Ebből arra következtethetünk, hogy $\varepsilon'_A \bar{\omega}_A = \varepsilon''_A \omega_A$.

f) A két detektort a kijelölt irányhoz 30° -os szög alatt helyeztük el (44/b ábra). Ekkor \bar{p} -ra a megnövekedett $0,283 \pm 0,005$ értéket kaptuk. Ezt a növekedést okozhatja az, hogy a reakcióban a direkt mechanizmus is szerepet játszik és a 44/b ábra elrendezésében a 44/a ábráival szemben a direkt $(n, 2n)$ reakcióból származó neutronok is adhatnak járulékot az N_A , N_B és N_k koincidenenciákhoz. Megjegyezzük, hogy a megváltozott geometriában várható az átszórás növekedése. Ez azonban \bar{p} csökkentését okozná.

Természetes ólomra hasonló módszerrel $1,8 \pm 0,2$ barn-t kaptunk az $(n, 2n)$ hatáskeresztmetszetre, szemben az *Ashby* által mért $2,74 \pm 0,20$ barn-os értékkel [As58].

Az $(n, 2n)$ reakció hatáskeresztmetszete ólomra és bizmutra nem ismeretes eléggé pontosan. Ennek ellenére megállapíthatjuk, hogy az általunk mért értékek kisebbek, mint amit aktivációval, vagy más, a kilépő neutronok irányára érzéketlen módszerrel mértek. Méréseink szerint a tiszta kompaund hatáskeresztmetszet a teljes $(n, 2n)$ hatáskeresztmetszetnek legfeljebb 70 – 80% -a ólomban és bizmutban. Az $(n, 2n)$ reakció egy része $14,7$ MeV-en valamilyen direkt mechanizmuson keresztül történik. Az a tény, hogy kisebb értéket kaptunk, figyelembe véve a kiértékelési eljárásunkat, arra utal, hogy a kompaund-direkt mechanizmus nem játszhat jelentős szerepet.

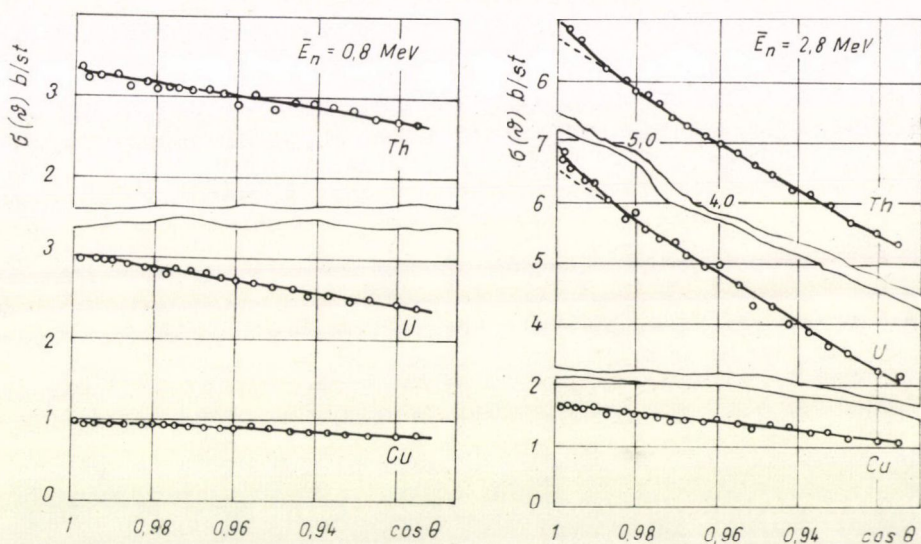
VI. Gyorsneutronok kisszögű rugalmas szórásának „anomáliája”

1. §. Bevezetés

Az elmúlt évek során sokat foglalkoztak a gyorsneutronok kisszögű rugalmas szórásának vizsgálatával. A problémát *Alekszandrov* és munkatársai vetették fel [Al55], [Al57], [Al57a]. Gyorsreaktornál, $E_n = 1$ – 5 MeV energiánál szórás kísérletet végeztek Pu, U, Sn, Pb, Cu magokon 4° – 25° szögtartományban. U és Pu esetében a fekete magmodell alapján való illesztés a $\vartheta < 10^\circ$ tartományban nem volt megfelelő, míg a többi vizsgált magnál a teljes vizsgált szögtartományra jó

egyezést adott. Ezt a jelenséget nevezték a továbbiakban „kisszögű anomáliának”. (Az elnevezés [Al57] szerzőktől ered.)

A kísérletet U, Th, Cu magokon megismételték [Ale61]. A gyorsreaktor folytonos spektrumát „megszűrték”, 2,8 MeV átlagenergiánál az anomália reprodukálódott, 0,8 MeV átlagenergiánál az illesztés az egész vizsgált szögtartományban kielégítő volt (48. ábra). Dukarievics és Gyumin [Du63] megismételték Alekszandrov méréseit 14,2 MeV energiánál. A két mérés eredményei erősítik egymást: Pb, Bi és W-nál az optikai modell diffrakciós közelítésében számolt differenciális hatáskeresztmetszet adatokkal egyező kísérleti eredményeket kaptak. U, Th és Pu magoknál kis szögeknél a kísérleti eredmények az elméleti görbe fölött helyezkednek el (49. ábra). Az eltérés mintegy 20%. Más szerzők [An65], [El66], [Re65] az elmélettől való eltérést 7, 3, 0,8 és 0,6 MeV bombázó energiánál is tapasztalták.



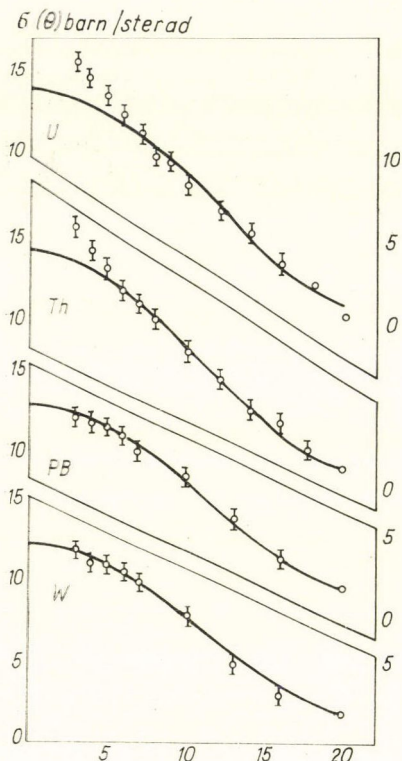
48. ábra. Rugalmas neutronszerzés mérések gyors reaktornál, szűrt neutronnyalábokban $E_n = 0,8$ MeV és 2,8 MeV [Ale 61]

Kézenfekvőnek látszott az előreszóródott neutrontöbbletet a mag és a neutron között fellépő hosszú hatótávolságú kölcsönhatás következtében fellépő effektusnak tulajdonítani. A mag Coulomb-terének és a neutron mágneses momentumának kölcsönhatása által létrehozott neutronszerzés, az ún. Schwinger-szerzés erősen előre irányul. Az anomália megállapításánál a Schwinger-szerzést számítás alapján figyelembe vették, járulékat a mért differenciális hatáskeresztmetszetből levonták.

Mraskó Péter megvizsgálta*, hogy a kis szögeknél tapasztalt neutrontöbblet magyarázata lehet-e az, hogy a Schwinger-szerzés számításánál alkalmazott közelítések nem jogosak. A közelítés lényege az, hogy pontszerűnek tekintették a magot. Mraskó számításai szerint a pontszerűség feltételezése kevésbé befolyásolja a dif-

* Nem publikált munka.

ferenciális hatáskeresztmetszetet, továbbá ez a közelítés csak növeli a Schwinger-szórás. Számításában feltételezte, hogy a mag erősen abszorbeál. Ez arra vezet, hogy az alacsony parciális hullámok nem adnak járulékot a Schwinger-szóráshoz, tehát a hatáskeresztmetszet kisebb lesz mint pontszerű töltés esetén. Végeredményben ezen az úton nem sikerült magyarázatot találni a kis szögekben tapasztalt neutrontöbbletre.



49. ábra. Rugalmas neutronszerzés mérések $E_n = 14,2$ MeV neutronenergiaánál [Du63]

Walt és Fossan [Wa65] ugyancsak elektromágneses kölcsönhatásban, a neutron elektromos polarizálhatóságában keresték az anomália magyarázatát. Feltételezve, hogy az anomália a polarizálhatósággal kapcsolatos, Alexandrov kísérleti adataiból kiszámították, hogy mekkora indukált elektromos dipólmomentummal lehetne az anomáliát értelmezni. Ehhez $\alpha_n > 5 \cdot 10^{-40} \text{ cm}^3$ értékű dipólmomentum kellene, ami ellentmond a más módszerekkel meghatározott értékeknek ($\alpha_n < 10^{-40} \text{ cm}^3$). A szerzők a polarizációs és nukleáris szórás interferenciáját is vizsgálták, de azt találták, hogy ez az effektus sem lehet felelős a kis szögekben szórt neutrontöbbletért.

Redmond [Re65] azzal próbálkozott, hogy a nukleáris kölcsönhatást leíró potenciálban extranagy spin pálya tagot tételezett fel. Azt találta, hogy a differenciális hatáskeresztmetszetben a nukleáris szórás amplitúdó spin-pálya kölcsönhatástól függő tagja és a Schwinger-szórás amplitúdójának interferenciája kis szögekben konstruktív, míg nagyobb szögekben ez az interferencia destruktív. Az interferencia ilyen jellege elvben lehetőséget ad az anomália értelmezésére. Redmond javaslatát azonban el kell vetni Elwyn [El66] kísérlete alapján, aki 0,83 MeV energiájú neutronok rugalmas szórását és a szórt neutronok polarizációját mérte. Az anomáliát tapasztalta, de ez nem adott járulékot a szórt neutronok polarizációjához. A polarizáció normál erősségű spin-pálya kölcsönhatásnak felelt meg.

giájú neutronok rugalmas szórását és a szórt neutronok polarizációját mérte. Az anomáliát tapasztalta, de ez nem adott járulékot a szórt neutronok polarizációjához. A polarizáció normál erősségű spin-pálya kölcsönhatásnak felelt meg.

2. §. $^{238}\text{U}(n, \alpha n')^{234}\text{Th}$ reakció lehetőségének kísérleti vizsgálata

Gyorsneutronok rugalmas szórásának kis szögű anomáliája csak az U, Th és Pu magokkal kapcsolatban merült fel. Így kézenfekvő volt az anomáliát ezen magok alfa bomlással szembeni instabilitásával kapcsolatba hozni. Feltételeztük az U mag neutronszerzéssel indukált alfabomlását, azaz a $^{238}\text{U}(n, \alpha n')^{234}\text{Th}$ reakció bekövetkezését. A folyamat differenciális hatáskeresztmetszetét Hraskó és Kövesi [Hr66]

határozta meg. A számítást a Shapiro-féle diszperziós elmélet alkalmazásával végezték el. Formulájuk azt adja, hogy a neutron nagy valószínűséggel lép ki, előre a bombázó neutronokkal megegyező irányban és ekkor a kilépő neutron energiája megegyezik a rugalmasan szórt neutron energiájával. A feltételezett reakció tehát szolgáthatja a szórás hatáskeresztmetszetben kis szögeknél tapasztalt többletet.

Kísérletet végeztünk a neutronszórással indukált alfa bomlás kimutatására [A66], [A66a]. A reakció kimutatásához olyan eseményeket kerestünk, amikor szimultán két részecske lép ki: a bombázó neutron irányával azonos irányban, szűk kúpszögben, 14 MeV energiájú neutron és vele koincidenzában 4,2 MeV energiájú alfa részecske.

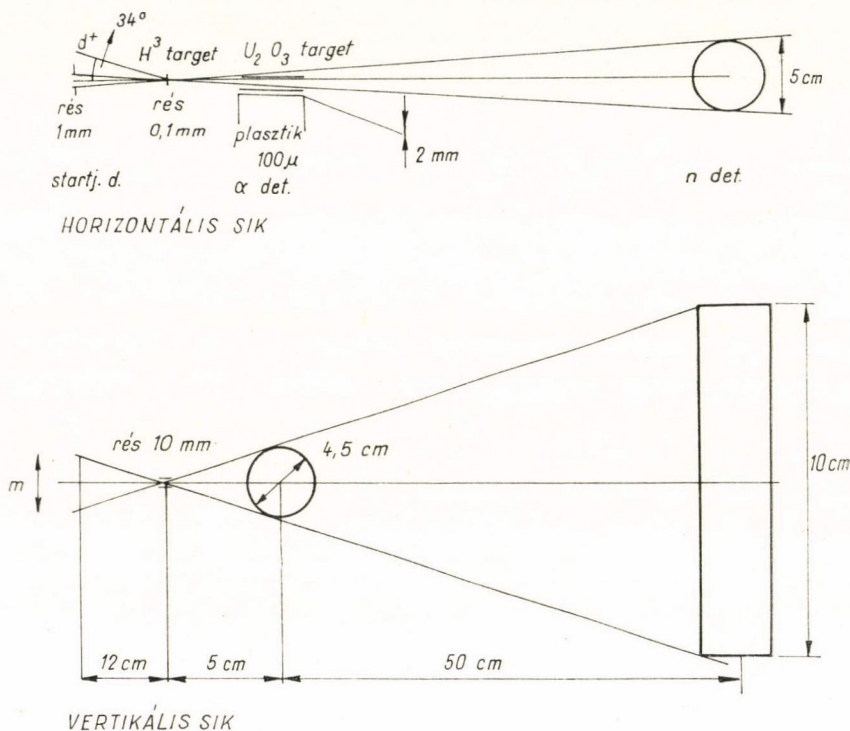
Az U target alumínium fóliára felvitt U_2O_3 volt. A neutrontérszögben így ^{238}U , ^{16}O és ^{27}Al magok voltak jelen. A 14 MeV bombázó energiánál lejátszódó zavaró reakcióknak nagy a hatáskeresztmetszete. Ezek közül biztonsággal kell kiválasztani a keresett $^{238}(n, \alpha n')^{234}Th$ reakciót azáltal, hogy a keletkező két reakcióterméket koincidenzában detektáljuk a „start” alfarészecskével.

- A kimutatandó reakció hatáskeresztmetszetének Dukarievics [Du63] adatai alapján becslve kb. 15 mb-nak kell lennie ahhoz, hogy a kis szögbe kilépő többletet fedezze. Ezen érték alapján az alkalmazott urántargetre a reakció bekövetkezésének valószínűsége $p \approx 5 \cdot 10^{-3}$. A reakcióban keletkező neutronok energiája 14 MeV, az alfarészecskéké 4,2 MeV.
- Az ^{238}U alfabomlásának felezési ideje $T_{1/2} = 4,49 \cdot 10^9$ év. Az általunk használt targetnél a bomlások száma $4,9 \cdot 10^3$ /sec. Ezekhez az eseményekhez nem tartozik a neutrontérszögben neutron és visszalökött alfarészecske, és így csak véletlen koincidenzákat okozhatnak.
- Az ^{238}U mag a primér neutronok hatására hasad. A hasadás bekövetkezésének valószínűsége a targetben $p_h \approx 0,18$. A hasadási termékek hatótávolsága kb. megegyezik a 4,2 MeV energiájú alfarészecskék hatótávolságával. A targetből kijutva megszólaltatják az alfadetektort. A hasadási neutronok és a hasadást kísérő gammák megszólaltatják a neutrontdetektort. Ez a reakció tehát hasonló típusú, mint amilyenek a kimutatását célul tűztük ki. A kétfajta folyamat megkülönböztetésére a neutronenergia ad lehetőséget. A hasadási neutronok energiaspektrumának maximuma 1 MeV közelében van. 10 MeV-nél nagyobb energiájú neutronok kilépésének valószínűsége 2,5 nagyságrenddel kisebb, mint az 1 MeV energiájúaké. Az energiaeioszlást figyelembe véve és izotróp szögeloszlást feltételezve a hasadási termékekre azt kapjuk, hogy a hasadási koincidenzák száma kb. 300-szor kisebb, mint a keresett effektusra becsült koincidenzák száma.
- A 14 MeV energiájú neutronok hatására bekövetkező további zavaró reakciók: $^{16}O(n, p)^{16}N$, $^{16}O(n, \alpha)^{13}C$ és $^{16}O(n, d)^{15}N$, de ezen reakciók hatására nem kaphatunk hármas szisztematikus koincidenzákat, hanem csak a véletlen koincidenzákat számának kialakulásában játszanak szerepet.

A mérésnél használt target és detektorelrendezés az 50. ábrán látható. A target 1,5 mg/cm² vastagságú, 45 mm átmérőjű alumínium fóliára felvitt 2,5 mg/cm² természetes uránoxid. A neutronok átlagos repülési útja a targetben 3,8 cm. A reakciótarget jobb kihasználása és a neutrontérszög optimális meghatározása érdekében „vonalszerű” neutronforrást valósítottunk meg a tríciumtarget blendezésével,

amelynek mérete $0,1 \cdot 10$ mm volt. A gyorsító ilyen blendézésnél $10^8/\text{sec}$ neutron-hozamot biztosított.

A startjel-detektor térszöge $\Omega_{st} = 3,8 \cdot 10^{-3}$, az U target térszöge $\Omega_t = 2,5 \cdot 10^{-5}$. Az U fólia elhelyezése $\sim 0,1$ mm pontosságot kíván, ui. a target helyén a startjel-detektor térszögének a vertikális síkba eső mérete $0,4$ mm. A geometriát az alfa-detektor és a startjel-detektor közötti koincidenciaszám alapján állítottuk be oly módon, hogy az U fólia teljesen a térszögbe kerüljön, az alfadetektor plasztik fóliája pedig teljesen kívül a térszögön.

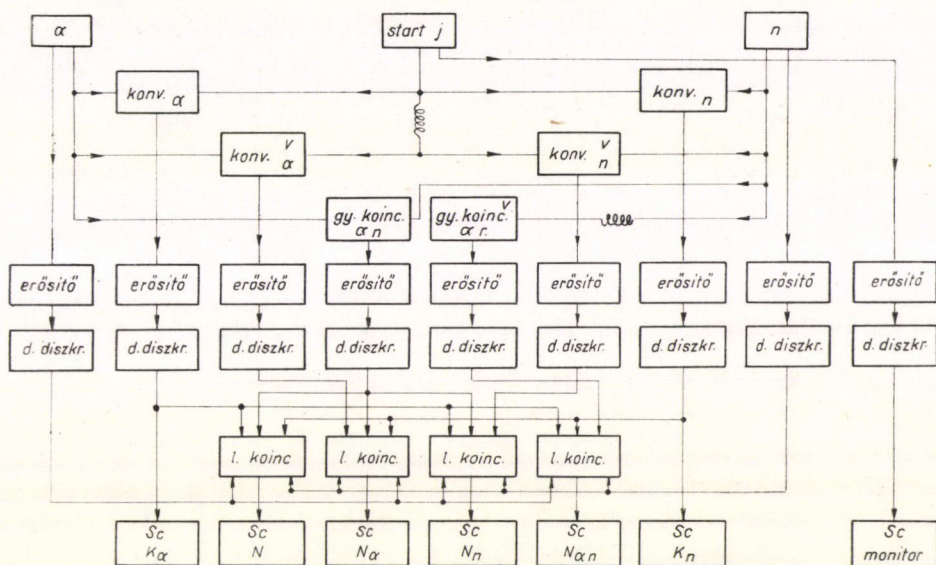


50. ábra. Target és detektor elhelyezés az $^{232}\text{U}(n, \alpha n') ^{234}\text{Th}$ magreakció kimutatására

A targetnek a neutronforrásra vonatkozó térszögét kísérleti úton határoztuk meg, a hasadás és az oxigénben keltett reakciók hatáskeresztmetszete alapján. A tartóanyag (Al fólia) jelenlétét úgy vettük figyelembe, hogy ugyanolyan U réteg nélküli „targettel” is mértük a koincidenciaszámot.

A regisztráló berendezés blokk-sémája az 51. ábrán látható. A neutron és alfa detektor közé, valamint a startjel-detektor és az alfadetektorok közé időamplitúdó konvertereket helyeztünk el, amelyeket gyorskoincidencia körökként használtunk, azáltal, hogy utána differenciál diszkriminátorral a mérendő időintervallumnak megfelelő amplitúdó tartományt kijelöltük. Az alfa detektor és a neutron detektor közé diódahidas gyorskoincidencia kört helyeztünk el. A véletlen koincidenciák

egyidejű párhuzamos regisztrálása érdekében a megfelelő koincidenčiaágakat és az utánuk következő áramköröket megdupláztuk. A beiktatott késleltető kábelek biztosították azt, hogy ezekkel az egységekkel csak véletlen koincidenciókat regisztráljunk. A különböző típusú véletlen koincidenciák figyelembevétele az V. 3. §-ban ismertetett módon történt.



51. ábra. Regisztrálóberendezés az $^{232}\text{U}(n, \alpha')^{234}\text{Th}$ koincidenciamérésnél

Az alfadetektor, amely az U targetból kilépő töltött részecskéket regisztrálta, a „start detektorhoz” hasonlóan 50 mm átmérőjű, 100 μ vastagságú, plasztik szcintillátor fólia és RCA 6810/A elektronsokszorozóból állt, amelyet az U fóliától 2 mm távolságra helyeztünk el, ahol már kívül esett a neutronok térszögén. Az energiamérésre szolgáló lassú ágban felvett amplitúdó-spektrumot az 52. ábrán tüntettük fel. A spektrum elejének torzulását az U-ból hegyesszög alatt kirepülő alfarészecskék okozzák, amelyek nagyobb energiavesztéssel érkeznek meg a detektorhoz.

A neutrontetektor 10 cm hosszúságú, 5 cm átmérőjű plasztik szcintillátor, és RCA 6810/A elektronsokszorozó. A startjel és neutronjel közötti koincidenca időfelbontása $2\tau = 8 \text{ m}\mu\text{s}$, a startjel és az alfadetektor közötti koincidenca kör időfelbontása $2\tau = 5 \text{ m}\mu\text{s}$, a neutron és alfadetektorok közötti gyorskoincidenca kör időfelbontása $2\tau = 10 \text{ m}\mu\text{s}$ volt.

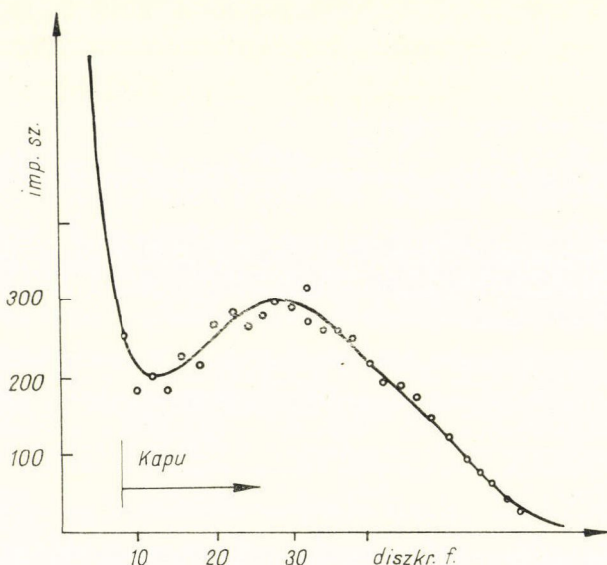
A teljes berendezést az ^{238}U mag 14 MeV energiájú neutronokra vonatkozó hasadási hatáskeresztmetszetének megméréseivel ellenőrizték. Az így kapott hatáskeresztmetszet értéke $\sigma_f = 1,1 \pm 0,4 \text{ b}$, ami kielégítően egyezik az irodalomban publikált adattal.

A regisztrálást kb. két napig végeztük folyamatosan. Ez idő alatt a koincidenciák száma $N=140$ és a véletlen koincidenciák száma $N_v=137$ volt. Tehát nem

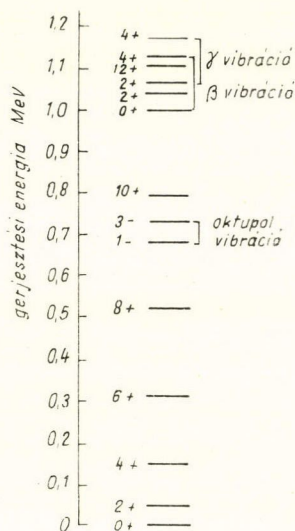
kaptunk szisztematikus koincidenenciákat. A statisztikus hiba alapján a keresett reakció hatáskeresztmetszetére egy felső korlátot adhatunk meg. A kétszeres statisztikus hibát tekintve a keresett reakció hatáskeresztmetszete

$$\sigma \leq 0,5 \text{ mb}$$

és a nem becsült 15 mb. Ebből következik, hogy ha az $^{238}\text{U}(n, \alpha n') ^{234}\text{Th}$ reakció végbe is megy, nem tudja magyarázni a gyorsneutron kisszögű rugalmas szórásánál talált anomáliát.



52. ábra. Az ^{238}U α bomlásának amplitúdó spektruma az α detektor analóg ágában



53. ábra
Az ^{238}U nívósémája

A mérés negatív eredményéből azonban kissé általánosabb következtetést is levonhatunk a direkt kölcsönhatások diszperziós elméletének magfizikában való alkalmazására vonatkozóan. Míg ez az elmélet az elemirész fizikában nagyon termékenynek bizonyult, az adott magfizikai alkalmazását kísérletünk nem igazolta. A direkt kölcsönhatások diszperziós elmélete az $^{238}\text{U}(n, \alpha n') ^{234}\text{Th}$ reakció bekövetkezését „megjósolja”, mérésünk pedig cáfolja ezt.

Mérésünk egyben cáfolja Elwyn [El66] elképzelését, amely szerint az anomália a hasadással kapcsolatos.

3. §. Az „anomália” értelmezése

Miután nem sikerült az anomáliát az indukált alfa bomlással értelmezni, azt a kérdést vetettük fel, vajon egyáltalán létezik-e anomália, vajon a kis szögeknél tapasztalt neutrontöbblet nem az elméleti várákozás és a mérési eredmények helytelen összevetéséből származik-e?

Az U mag erősen deformált. Megvizsgáltuk azt, hogy miként módosul a kis-szögű szórás, ha figyelembe vesszük a deformációt [A68a]. Az ^{238}U mag nívósémáját tekintve (53. ábra) nyilvánvalónak látszik, hogy a kísérleti adatokban a rugalmas és rugalmatlan szórási hatáskeresztmetszetek összege szerepel, olyan rugalmatlan szórásoké, amelyek az alap-állapotra épülő rotációs sáv gerjesztésére vezetnek. A repülési idő spektrométerek tipikus energiafelbontása néhány 100 keV. Dukárievecs mérésénél az energiafelbontás 1 MeV-nél is rosszabb volt.

A számításokat *Hraskó Péter* végezte el. A Blair-féle általánosított modellt alkalmazta adiabatikus közelítésben [Bl65]. Kis szögekre érvényes közelítő kifejezést állított elő a rugalmas szórás és a rotációs sávot gerjesztő inelasztikus szórás összegére:

$$\frac{\bar{\sigma}(\vartheta)}{\cos^4 \frac{\vartheta}{2}} \simeq \bar{\sigma}(0) - \gamma \sin^2 \vartheta$$

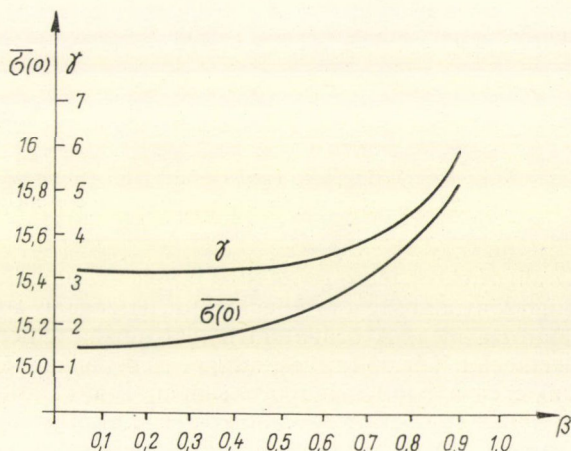
$\sigma(0)$ és γ tartalmazzák a targetmag deformációját (β). Ezeket ábrázoltuk az 54. ábrán.

Az elektromágneses átmeneteknél $B(E2)$ méréseiből nyert $\beta_{EM} = 0,446 \pm 0,008$. β_{EM} a töltéeloszlásra érzékeny, a tömegdeformáció esetleg ettől eltérő lehet. Azonban $\bar{\sigma}(0)$ és γ $\beta=0$ körüli elég széles tartományban gyakorlatilag nem függ a deformációtól. Tehát a deformáció kis szögeknél nem eredményezhet olyan neutrontöbbletet, amellyel az anomáliát magyarázni lehetne, ehhez túl nagy tömegdeformációt kellene feltételezni. Látni fogjuk azonban, hogy a rotációs sávot gerjesztő inelasztikus járulékok, amelyet energiafelbontási okokból a rugalmas szórási kísérleti adatok tartalmazznak nagyobb szögeknél, különösen a diffrakciós minimumoknál jelentős és ezáltal az elméleti görbe menetét a kis szögeknél is befolyásolja.

Dukárievecs és munkatársai 3° – 20° szögtartományban vizsgálták a 14 MeV-es neutronok rugalmas szórását uránon. Egy

további rugalmas szórás mérés ismert az irodalomban 14 MeV körüli energiánál uránon [Coo 58]. Itt viszont a kis-szögű tartományt nem vizsgálták $\vartheta > 15^\circ$ -tól mérték.

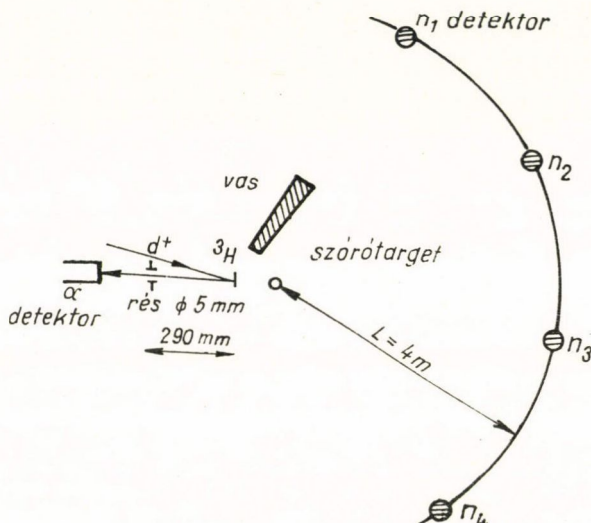
Feltételeztük, hogy ha széles szögtartományban mért kis és nagy szögeket is tartalmazó kísérleti adatokat értékelünk ki az optikai modellel és az inelasztikus járulékokat is figyelembe vesszük, realisabb képet kapunk a kis-szögű szórásról. Ehhez pontosabb és jobb szög-, valamint energiafelbontással mért kísérleti adatokat kellett használni, mint amilyenek rendelkezésre álltak. Ezért megmértük a 14,7 MeV energiájú neutronok szórásának szögeloszlását ^{238}U targetmagon [A68b]. Esetünk-



54. ábra. $\bar{\sigma}(0)$ és γ függése β deformációparamétértől

ben az energiafelbontás 14 MeV-nél $\Delta E \approx 0,5$ MeV volt. Ennél a felbontásnál a rugalmasan szórt, valamint a 2^+ és 4^+ nivókat gerjesztő inelasztikusan szórt neutronok együttes eloszlását regisztráljuk.

A kísérleti elrendezés az 55. ábrán látható. A szórótárgyat $\lambda_{\text{att}}/4$ sugarú henger. λ_{att} a bombázó neutronokra vonatkozó atenuációs szabad úthossz. A bombázó neutronnyaláb jó kollimációja, illetve a szórási szög jól definiáltsága érdekében a tríciumtarget elé a deutérium nyaláb útjába $0,1 \times 0,5$ mm-es rést helyeztünk el.



55. ábra. Target és detektor elrendezés a neutronszórási szögeloszlásának mérésénél uránon

Az alfadetektor térszöge $2,7 \times 10^{-5}$ volt. Az alfarészecskékkel kijelölt neutronnyaláb szögbizonytalanságát az alfadetektor térszöge és a deutérium nyaláb energia-szórása határozza meg. A deutérium nyaláb útjába a neutronforrás méretét meghatározó blende előtt két 50 cm hosszúságú, 5 cm sugarú fémhenger alakú vas tömböt helyeztünk el egymástól 0,5 mm távolságban. Ezáltal a detektorokat részben leárnyéktoltuk a selbstarget neutronoktól, részben a selbstarget neutronok forrása távolabb került a targettől. A direkt neutronok ellen, amelyek a véletlen koincidenziákon keresztül a regisztrálási időt befolyásolják, a nagyobb szórási szögeknél 50 cm hosszú vas-henger árnyékolást használtunk. A neutrontetektor 5 cm átmérőjű, 10 cm hosszúságú henger alakú plasztik szcintillátor volt, amelynek tengelye a neutron iránnyal párhuzamos. A teljes szögfelbontás $\Delta\theta = \pm 1,4^\circ$ volt. Kétfokos lépésekben mértünk $5^\circ \leq \theta \leq 18^\circ$ tartományban, majd 15° -onként $20^\circ \leq \theta \leq 100^\circ$ tartományban. A neutron-detektorok küszöbérzékenysége 3 MeV volt.

Egyidejűleg négy detektort alkalmaztunk. A repülési távolság 4 m volt. A regisztrálást egy négycsatornás gyorsneutron repülési idő spektrométerrel végeztük.

A tríciumtarget hátlapja mint szóróanyag szisztematikus háttérrel jelent a repülési idő spektrumban. Ezért szórótárgyval és szórótárgy nélkül felváltva regisztráltunk. A háttér további komponensét a véletlen koincidenziák képezik, amelyet

megfelelő késleltetés alkalmazásával a szisztematikus eseményekkel párhuzamosan egyidejűleg regisztráltunk.

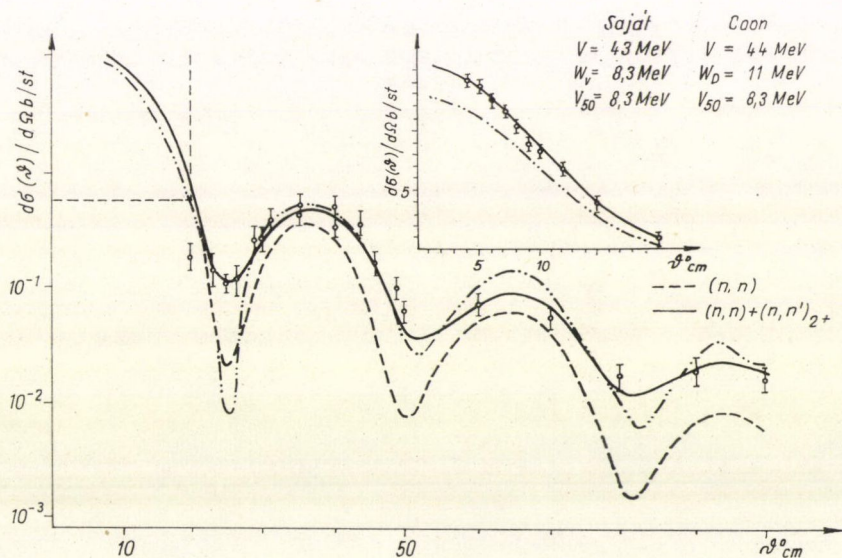
A kísérleti adatokhoz az optikai modellel számított elméleti görbét illesztettünk. A szokásos alakú komplex potenciált tételeztünk fel:

$$U(r) = (V + W_V)f(r) + V_{so} \frac{\hbar}{r} \frac{d}{dr} f(r) l \cdot \sigma$$

ahol $f(r)$ a Saxon—Woods formafaktor. Az optimális illesztés (56. ábra) a következő paramétereknél valósult meg:

$$V = 43 \text{ MeV}, \quad W_V = 8,3 \text{ MeV}, \quad V_{so} = 8,3 \text{ MeV}, \quad a_V = 0,65f, \quad a_W = 0,47f, \quad r_0 = 1,25f.$$

Az ábrán feltüntettük [Coo 58] mérési adatait és optikai modell analízisének eredményét is. Felületi abszorpciót tételeztek fel és mint látható a kis szögekben ehhez a görbéhez képest jelentkezik az anomália.



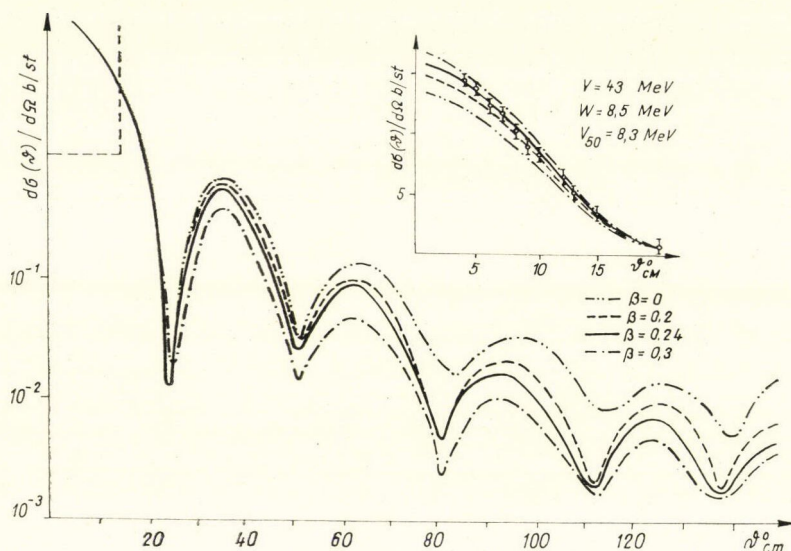
56. ábra. 14,7 MeV energiájú neutronok rugalmas szórása uránon. Illesztési paraméterek

$$V = 43 \text{ MeV}, \quad W_V = 8,3 \text{ MeV}, \quad V_{so} = 8,3 \text{ MeV}, \quad a_V = 0,65f, \quad a_W = 0,47f, \quad r_0 = 1,25f$$

Az illesztési eljárásnál figyelembe vettük az urán első nívójának gerjesztésére vonatkozó rugalmatlan szórást [Ba 64], mivel az mért adatainkban is jelen volt. E járuléka kis szögekben nem jelentős, de másutt, különösen a diffrakciós minimumokban számottevő, és befolyásolja az illesztés jószágát. A totális hatáskeresztmetszetek egyezése kielégítő.

Magyarázatunk, mint látható, azon alapul, hogy a kísérletileg mért hatáskeresztmetszet a rotációs nívók gerjesztésére vezető rugalmatlan szórás járulékát is tartalmazza. Nem mondunk-e ellent ezzel annak a korábbi megállapításunknak, amely szerint a rotációs nívók gerjesztési valószínűsége kis szögekben elhanyagol-

ható a rugalmas szórás valószínűsége mellett? Semmiképpen sem. Az optikai potenciál paramétereinek megállapítását célzó illesztési eljárás során ugyanis teljes szögterományra vonatkozó mérési adatokat használunk és az optikai paramétereket az egész szögterományra vonatkozóan optimalizáljuk. Mint már utaltunk rá, léteznek olyan szögterományok, ahol a rotációs nívók gerjesztésére vezető rugalmatlan szórás dominál, vagy legalábbis összemérhető a rugalmas szórással. Ezért ha az illesztés alapjául szolgáló formula csak a rugalmas szórásra vonatkozik, nem csodálkozhatunk azon, hogy a számított szögeloszlás a mérési adatokat csak pontatlanul reprodukálja. Az, hogy ez a pontatlanság éppen kis szögeknel szembeszökő, esetleg csak véletlen.



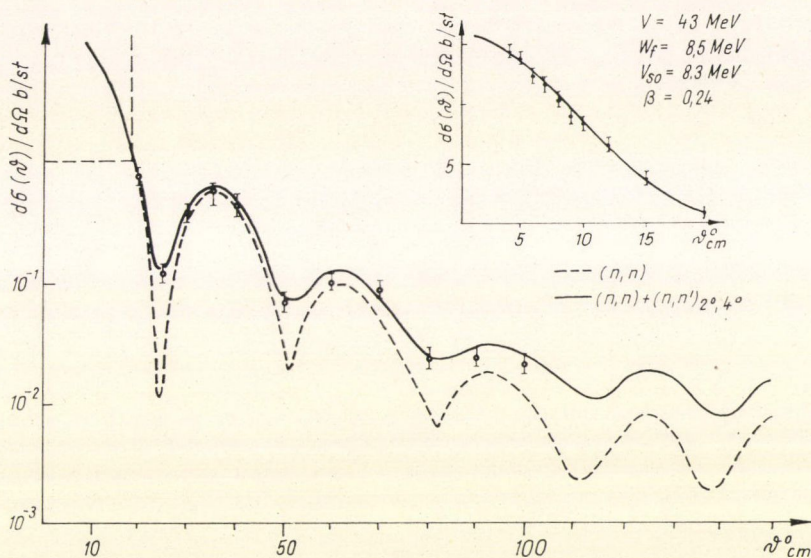
57. ábra. 14,7 MeV neutronok rugalmas szórása uránon. Az analízis csatornacsatolásos program segítségével β_2 változtatásával történt [Pa70]

A helyes illesztési eljárást tehát nem a közvetlen mérési adatok alapján kell végezni, hanem belőlük előbb le kell vonni a rugalmatlan járulékat. Annak ellenére, hogy ez a levonandó hatáskeresztmetszet kis szögeknel kicsi (ezt taglaltuk korábban), az illesztési paraméterek megváltoztatásán keresztül kis szögekben is befolyásolja a számolt hatáskeresztmetszetet.

Arra következtethetünk, hogy kisszőgű „anomália” legalábbis 14 MeV neutron-energián nem létezik, a szórás az urán esetében is jól leírható az optikai modellel, ha figyelembe vesszük, hogy a kísérleti adatokban benne foglaltatik az inelasztikus nívók gerjesztő járulék. Időközben hasonló analízist végzett [Go67] $E_n=4$ MeV energiánál és ő sem talált kisszőgű anomáliát.

Pála [Pa70] elvégezte az uránon rugalmasan szórt 14,7 MeV energiájú neutronok analízisét az általánosított optikai modell, illetve Tamura csatorna csatolásos programjával (lásd VII.). A Wilmore—Hodgson neutronpotenciálból [Wi64] vagyis a következő paraméterekből indult ki: $V=43$ MeV, $W_D=9,1$ MeV, $V_{50}=8,3$ MeV,

$r_0 = 1,25$ f, $a_v = 0,66$ f, $a_w = 0,48$ f. A Coulomb-gerjesztési kísérletek alapján $\beta_2 = 0,24$. A 2^+ és 4^+ nivókat csatolta. Az 57. ábrán a rugalmas szórás differenciális hatáskeresztmetszetét láthatjuk β_2 függvényében. Az 58. ábrán $\sigma = \sigma_{n,n} + \sigma_{n,n'}^{2^+} + \sigma_{n,n'}^{4^+}$ összeg illesztését láthatjuk β_2 változtatásával. $W_D = 8,5$ és $\beta_2 = 0,24$ értéknél az illesztés optimális. Ezen értékekkel $\sigma_{\text{totális}}$ számított értéke jól egyezik a kísérleti értékkel.



58. ábra. 14,7 MeV neutronok rugalmas szórása uránon. Optimális illesztés csatornacsatolásos programmal $W_D = 8,5$ és $\beta_2 = 0,24$

Nem véletlen, hogy a csatornák közötti csatolás figyelmen kívül hagyásával is sikerült korábban kielégítő illesztést elérnünk és az anomáliát „eltüntetni”. Akkor ugyanis térfogati abszorpciót tételeztünk fel és mint Pállá is rámutat, a csatornák közötti csatolás úgy hat, mintha a kölcsönhatás a mag teljes térfogatára eloszlana.

VII. Kollektív nivók vizsgálata 14 MeV energiájú neutronokkal

1. §. Bevezetés

A magreakciók mechanizmusának problémája szinte egyidős a magfizikával. A probléma megoldásához a különböző magmodellek sorozatával történik a közeledés. Az (n, n') magreakció vonatkozásában a legelső használható modell a Bohr-féle közbenső mag hipotézisen alapuló statisztikus modell volt. Ezen elmélet alapján a neutronok energiaspektrumára Weiskopf már a 30-as évek elején levezette formuláját, az ún. párolgási vagy Maxwell-spektrumot. Ennek kísérleti igazolására azonban csak az 50-es évek elején került sor a repülési-idő technika kidolgozása

után. Az első energiaspektrumot ezzel a módszerrel *O'Neill* mérte [Ne54]. Kísérleti eredményei a mérési hibán belül igazolták a Maxwell alakot.

A neutronok rugalmatlan szórásánál várható szögeloszlás számításával *Hauser* és *Feshbach* [Ha52], valamint *Ericson* [Er60] foglalkozott. Megmutatták, hogy ha a gerjesztési energia elég nagy ahhoz, hogy a kompaund mag gerjesztése a kontinuum tartományba essék, a szögeloszlás 90° -ra szimmetrikus. Ugyanez a helyzet alacsony energiánál, ha a gerjesztés a rezonanciatartományba esik és a nívók szeparálhatók, speciálisan a termikus tartományban a szögeloszlás izotróp lesz. Közbenső energiáknál, ha néhány nívó gerjesztődik, a szögeloszlás általában nem izotróp és a 90° -os szimmetria sem teljesül. 14 MeV neutron-energián mért kísérleti eredmények kiértékelésénél ezt a szimmetriát a statisztikus mechanizmus kritériumaként használták. Azt a folyamatot tekintették kompaundnak, ahol teljesült ez a szimmetria.

A neutronok energiaspektrumára vonatkozó mérésekkel csak az alacsony energiatartományban, 3–4 MeV alatt igazolták a statisztikus elméletet. Már *O'Neill* mérése is jelezte azt a tényt, hogy a nagy energiájú szórt neutronok száma magasabb, mint ami a párolgási spektrumnak megfelelő.

A spektrum nagyenergiájú végén az előreszórás jelentősen meghaladja a hátra-szórás. A szórt nyaláb ilyen előre irányba való „megkeményedését” az ún. direkt mechanizmussal értelmezhetjük.

A 60-as évek elején az (n, n') magreakció vonatkozásában az érdeklődés a kollektív állapotok szerepére terelődött. 1958-ban *Cohen* és *Rubin* [Co58] (p, p') reakciókat vizsgáltak 12,5 és 22,5 MeV közötti energiákon. A szórt protonok energia-spektrumában az alacsonyan fekvő kollektív nívók gerjesztésének megfelelő helyeken csúcsokat találtak. Ezekről az állapotokról korábban úgy látszott, hogy csak hosszú hatótávolságú kölcsönhatással, Coulomb-gerjesztéssel gerjeszthetők. *Satchler* és *Pinkston* [Sa61] mutatta meg elméletileg, hogy a direkt inelasztikus szórás analóg az elektromos multipól átmenettel. A magállapotok kollektív tulajdonságai mindkettőt megnövelik. Annak eldöntésére, hogy ilyen kollektív állapotok gerjesztése rövid hatótávolságú nukleáris kölcsönhatással is lehetséges, az (n, n') kísérletek a legalkalmasabbak. *Clark* és *Cross* [Cl64], valamint *Stelson* és *Satchler* [St65] 14 MeV-es neutronokkal végzett mérései kísérletileg igazolták a kollektív állapotokon való neutron szórás lehetőségét. Ezekbe a vizsgálatokba kívántunk bekapcsolódni, és további mérésekkel kiegészíteni.

A 2. §-ban röviden vázolni fogom a kollektív nívók elméletének alapjait, majd a 3. §-ban az elvégzett méréseinket tárgyalom. Méréseket végeztünk a ^{32}S és ^{56}Fe magokon. A kénre vonatkozóan korábban többen is végeztek (n, n') méréseket 14 MeV körüli neutron energián. Például [Cl64], [St65] stb. A kiértékelés az (n, n') mérésekben a DWBA módszerrel történt. Valószínűnek látszott, hogy a ^{32}S mag esetében a DWBA már nem jó közelítés és az időközben *Tamura* által kidolgozott [Ta67] csatornacsatolási programot kell alkalmazni. Ez a várakozás, mint látni fogjuk, teljes mértékben beigazolódtott. A ^{56}Fe esetében korábban nem létezett az irodalomban (n, n') mérés. Az egyik probléma itt is a DWBA közelítés jogossága; a másik ok, amiért ezt a magot az említett szerzők feltehetően kihagyták, az, hogy súlyosak a felbontási követelmények: $Q = -0,845$ MeV, s ezért nagyon hosszú a szükséges regisztrálási idő.

2. §. A kollektív állapotok vizsgálatának elmélete

Az alábbiakban [Ta65] és [Sa61] munkái alapján vázolni kívánom a kollektív nívók gerjesztésének elméletét. A szórási probléma Hamilton operátora:

$$H = T + H_T(\alpha) + V(r, \Theta, \varphi, \alpha), \quad (1)$$

ahol α a targetmagot jellemző dinamikai változók összessége. Felírásakor már kihasználtuk a neutronszórás és az elektromágneses kölcsönhatás analógiájára vonatkozó feltevésünket. Valóban, feltettük, hogy a V kölcsönhatás a beeső neutron valamilyen potenciálban elfoglalt helyzetétől függ, nem pedig a beeső neutron és mindegyik magbéli nukleon távolságától külön-külön. Ebben az a feltevés jut kifejezésre, hogy az elektromágneses átmenetekhez hasonlóan a rugalmatlan neutronszórás is a kollektív szabadsági fokokat érinti. Legáltalánosabb értelemben kísérleteink célja éppen ennek a feltevésnek a vizsgálata.

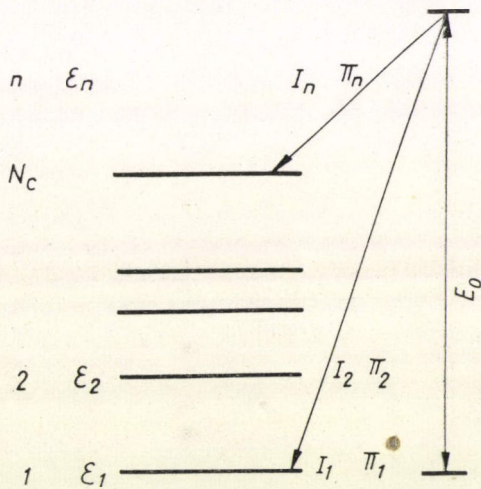
Tegyük fel, hogy a target mag sajátállapot-egyenletének megoldásai ismertek:

$$H_T \varphi_{I_n M_n} = \varepsilon_n \varphi_{I_n M_n} \quad (2)$$

Tételezzük fel, hogy a target magnak N_s olyan állapota létezik, amely erősen csatolódik az alapállapothoz. Legyen ezen állapotok indexe n , $n=1, \dots, N_s \cdot n=1$ az alapállapotot jelenti (59. ábra). Legyen az n -ik állapotban a mag spinje, paritása és energiája rendre I_n , π_n és ε_n . Ha a bombázó neutron energiája E_1 , az n -ik állapotnak megfelelő csatornából kimenő neutron energiája $E_n = E_1 - \varepsilon_n$. Az n -ik csatornában a neutron teljes impulzusmomentuma s spin és I_n pályamomentum esetén $j_n = s + I_n$. A j_n és I_n mennyiséget szintén vektorálisan kell összeadni, hogy a rendszer teljes J impulzusmomentumát és Π paritását megkapjuk:

$$J = j_n + I_n \quad \text{és} \quad \Pi = \pi_n (-1)^{I_n} \quad (3)$$

Belátható, hogy I_n , j_n , I_n és π_n mennyiségek közül egyik sem jó kvantumszám. Csak J és Π lesznek jó kvantumszámok. Más szavakkal ez azt jelenti, hogy mindazok a parciális hullámok, amelyek esetében I_n és j_n kielégíti (3)-at, adott J és Π esetén csatolódnak és egy csatolt differenciálegyenlet rendszert alkotnak. Jelölje $n_c^{(n)}$ a csatolandó egyenletek számát $I_n j_n$ adott, (3)-at kielégítő értéksorozatánál, $N_c^{(n)}$ pedig $n_c^{(n)}$ maximális értékét. Ezek lehetséges maximális száma az n -ik I_n spinű



59. ábra. A magállapotok szemléltetése (n, n') szórásnál

nívóra vonatkozóan:

$$\begin{aligned}
 N_c^{(n)} &= I_n + 1 & \text{ha } s=0 & \text{ és } I_n = \text{egész} \\
 N_c^{(n)} &= I_n + \frac{1}{2} & \text{ha } s=0 & \text{ és } I_n = \text{félegész} \\
 N_c^{(n)} &= 2I_n + 1 & \text{ha } s=\frac{1}{2} & \text{ minden } I\text{-re} \\
 N_c^{(n)} &= 3I_n + 1 & \text{ha } s=1 & \text{ és } I_n = \text{egész} \\
 N_c^{(n)} &= 3I_n + \frac{3}{2} & \text{ha } s=1 & \text{ és } I_n = \text{félegész}
 \end{aligned} \tag{4}$$

Az állapotok közötti kölcsönhatás eredményeként a csatolódo parciális hullámok teljes összege adott J és Π értékpár által meghatározott $(l_n j_n)$ sorozatra:

$$n_c = \sum_{n=1}^{N_s} n_c^{(n)} \tag{5}$$

és ennek maximális lehetséges értéke:

$$N_c = \sum_{n=1}^{N_s} N_c^{(n)} \tag{6}$$

A szóhasználat tisztázására szögezzük le, hogy „parciális csatorna” valamely meghatározott l_n és j_n értékpár sorozathoz tartozó csatornát jelent, míg „ n -ik állapot”, vagy „ n -ik állapot csatorna” $(l_n j_n)$ -nek $n_c^{(n)}$ értéksorozatát jelenti. A numerikus számításoknál J értékét végig kell futtatni Π minden értékére J_{\min} -től (amely 0 vagy $\frac{1}{2}$ attól függően, hogy $I_n + s$ egész vagy fél-egész) J_{\max} -ig. $J_{\max} = I_1 + j_{\max}$ ahol $j_{\max} j_1$ azon maximális értéke, amelynek parciális hulláma még járulékot ad a rugalmas szórásban.

A szórási probléma Schrödinger-egyenlete:

$$H\psi = E_1\psi \tag{7}$$

A rendszer teljes állapotfüggvényét a következőképpen lehet felírni:

$$\psi = \frac{1}{r} \sum_{n, J, l_n, j_n} R(r)_{n, J, l_n, j_n} \sum_{m_j M_n} (j_n I_n m_j M_n | JM) \mathcal{Y}(r, \theta, \varphi, s)_{l_n, j_n, m_j} \varphi(\alpha)_{I_n M_n} \tag{8}$$

(8)-ban $R(r)_{n, J, l_n, j_n}$ a hullámfüggvény radiális része és

$$\mathcal{Y}(r, \theta, \varphi, s)_{l_n, j_n, m_j} = \sum_{m, l, m_s} (l m_l m_s | j m_j) i^l Y_{l m_l} \chi_{s m_s}$$

ahol $\chi_{s m_s}$ a neutron spin-hullámfüggvénye.

A potenciált két tagra lehet felbontani:

$$V(r, \theta, \varphi) = V_{\text{diag}} + V_{\text{coupl}} \tag{9}$$

V_{diag} potenciál a target állapotaira nézve diagonális és megegyezik a szokásos optikai modell potenciállal. A másik tag V_{coupl} a csatolást létrehozó potenciált jelenti a különböző target állapotok között. (7)-be a Hamilton-operátort (1) és (9) alapján,

valamint az állapotfüggvényt (8) alapján behelyettesítve, integrálás és átrendezés után a következő egyenletrendszeret kapjuk:

$$\left(\frac{d^2}{d\varrho_n^2} - \frac{I_n(I_n+1)}{\varrho_n^2} - \frac{1}{E_n} V_{\text{diag}} + 1 \right) R(r)_{nJ_n j_n} =$$

$$= \sum_{n' j'_n} \langle (\mathcal{Y}_{I_n j_n} \otimes \varphi_{I_n})_{JM} | V_{\text{coupl}} | (\mathcal{Y}_{I'_n j'_n} \otimes \varphi_{I'_n})_{JM} \rangle R(r)_{n' j'_n J_n j'_n} \quad (10)$$

ahol $\varrho_n = k_n r$, k_n hullámszám és \otimes a következőt jelenti:

$$(\mathcal{Y}_{I_n j_n} \otimes \varphi_{I_n})_{JM} = \sum_{m_j M_n} (j_n I_n m_j M_n | JM) Y_{I_n j_n} \varphi_{I_n M_n}$$

(10) N_c csatolt egyenletet reprezentál. Ezek a csatolt egyenletek tartalmazzák a szórás-probléma alapösszefüggéseit.

A (10) egyenletekbe a már említett „kollektivitáson” kívül a magreakcióra vonatkozó további feltevés nincs beépítve. Más szavakkal, a V_{diag} -ról és a V_{coupl} -ról semmit sem tettünk fel azon kívül, hogy milyen argumentumoktól függenek. Ezeket az operátorokat most olyan módon specializáltuk, hogy a deformált magra vonatkozó optikai potenciállal hoztuk őket kapcsolatba. Pontosabban, V_{diag} -t azonosítjuk az optikai potenciál deformációs paraméterektől független, gömbszimmetrikus részével, V_{coupl} -t pedig a deformációs paramétereket tartalmazó résszel. A V_{diag} és a V_{coupl} ilyen megválasztásában rejlő fizikai kép diszkussziójára alább még visszatérünk.

A nem gömbszimmetrikus potenciál radiális függésére Saxon—Woods-alakot és a deriváltját tételezik fel:

$$V(r, \theta, \varphi) = -(V + iW) \frac{1}{1 + \exp[(r-R)/a]} - 4iW_D \frac{\exp[(r-R)a]}{1 + \exp[(r-R)a]^2} -$$

$$- V_{\text{so}}(\sigma \cdot l) \lambda_\pi^2 \frac{1}{ar} \cdot \frac{\exp[(r-R)/a]}{1 + \exp[(r-R)/a]^2} \quad (11)$$

A potenciál ezen kifejezése, eltekintve attól, hogy a magsugár a polárszögektől függ $R = R(\theta, \varphi)$, teljesen azonos a szokásos optikai potenciállal. A kollektív mozgásokat ez a függés határozza meg. (11) kifejezésben a minket érdeklő neutronszórásra szorítkozva a Coulomb-kölcsönhatást elhagytuk.

Ha a mag gömbszimmetrikus, amely vibrációs mozgást végezhet:

$$R = R_0 \left[1 + \sum_{\lambda \mu} \alpha_{\lambda \mu} \alpha_{\lambda \mu} Y_{\lambda \mu}(\theta, \varphi) \right] \quad (12)$$

Tengelyszimmetrikus deformált mag esetében:

$$R = R_0 \left[1 + \sum_{\lambda} \beta_{\lambda} Y_{\lambda 0}(\theta') \right] \quad (13)$$

(12)-ben és (13)-ban $R_0 = r_0 A^{1/3}$, ahol A a tömegszám. (13)-ban θ' a maghoz rögzített koordináta-rendszerre vonatkozik.

Tengelyszimmetrikus deformált magoknál (11)-be (13)-at kell behelyettesíteni és $\sum_{\lambda} \beta_{\lambda} Y_{\lambda 0}(\theta)$ hatványai szerint sorfejtést végezni. A két eset, a vibráció és rotáció közötti eltérés csak annyiban jelentkezik, hogy $\alpha_{\lambda\mu}$ helyett β_{λ} és $Y_{\lambda\mu}$ helyett

$$Y_{\lambda 0}(\theta) = \sum_{\mu} D_{\mu 0}^{\lambda}(\theta_i) Y_{\lambda\mu}(\theta, \varphi)$$

kerül. Itt $D_{\mu 0}^{\lambda}(\theta_i)$ a forgási mátrix, (θ_i) pedig a maghoz rögzített koordináta-rendszer közötti Euler-szögeket jelenti.

A leírt eljárást abban foglalhatjuk össze, hogy V_{diag} a (11)-ben definiált V optikai potenciál α -tól (deformált mag esetén β -tól) független része, míg V_{coupl} a V α -ban (ill. β -ban) lineáris része.

A csatolás ilyen megválasztása nem korlátlan érvényességű, hanem egy határozott fizikai elképzelésnek felel meg. Hallgatólagosan feltételeztük, hogy a gerjesztési mátrixelem számítása a következő lépésekben történhet:

1. Először kiszámítjuk a rugalmas neutronszórás amplitúdóját az α deformációs paraméterek rögzített értéke mellett.
2. Az így kapott amplitúdóban a deformációs paramétereket operátornak tekintjük, ezáltal az amplitúdó maga is operátor lesz, amely a kollektív állapotokra hat.
3. Feltételezzük, hogy a gerjesztési mátrixelem nem más, mint ezen operátor-amplitúdó mátrixeleme a különböző kollektív állapotok között.

Ez az eljárás adiabatikus közelítés néven ismert és akkor alkalmazható, ha a kölcsönhatás ideje, vagyis a neutron mag körüli tartózkodásának időtartama kicsi ahhoz a τ_c karakterisztikus időhöz képest, amely alatt a mag alakja, vagyis a kollektív paraméterek lényegesen megváltoznak. A τ_c idő a $\tau_c \cong \text{nívótávolság}/\hbar$ képlet alapján becsülhető.

Annak érdekében, hogy szemléletesebben vázolhassuk a kísérleti adatok és az elmélet összevetésének módszerét, a DWBA számításoknál szokásos közelítéseket alkalmazzuk és a feladatot két csatornára korlátozzuk. Azt fogjuk vizsgálni, hogy a $J=0$ $M=0$ alapállapotból hogyan gerjesztődik a JM állapot:

- a) Az optikai potenciált minden csatornában azonosnak vesszük:

$$\langle \varphi_{00} | V(r, \alpha) | \varphi_{00} \rangle = \langle \varphi_{JM} | V(r, \alpha) | \varphi_{00} \rangle = U(r). \quad (14)$$

- b) Elhanyagoljuk az JM csatorna visszahatását a kezdeti csatornára. Ez a DWBA számítás alapvető közelítése a csatornacsatoláshoz képest.
- c) Az egyszerűség kedvéért a deformált Saxon—Woods-potenciált valósnak tekintjük, elhanyagoljuk a spin-pálya kölcsönhatást és a sorfejtés négyzetes tagját már elhagyjuk. Tehát:

$$V(r, \alpha) = \frac{V_0}{1 + \exp \left[\frac{r - R_0}{a} \right]} + \frac{V_0 R_0}{4a} \left[Ch \frac{r - R_0}{a} \right] \sum_{\lambda\mu} \alpha_{\lambda\mu} Y_{\lambda\mu}(\Omega) \quad (15)$$

Ezekkel az egyszerűsítésekkel a megoldandó egyenletek:

$$\begin{aligned} [\nabla^2 + k_0^2 - V(r)] \psi_{00}(r) &= 0 \\ [\nabla^2 + k^2 - V(r)] \psi_{JM}(r) &= \langle \varphi_{JM} | V(r, \alpha) | \varphi_{00} \rangle \end{aligned} \quad (16)$$

Határfeltételek:

φ_{00} = síkhullám + kifutó gömbhullám

ψ_{JM} = kifutó gömbhullám.

A két egyenlet szimultán megoldása $r \rightarrow \infty$ esetben a szórási amplitúdót szolgáltatja:

$$f_{00 \rightarrow JM}(\Omega) = -\frac{\langle J | |\alpha_J^+| | 0 \rangle}{\sqrt{2J+1}} \sum_{lm'} i^{l'-l} Y_{lm}(\Omega) \sqrt{4\pi(2l'+1)} I(lk, l'k_0) \int d\Omega' Y_{lm}(\Omega') Y_{JM}^*(\Omega') \cdot Y_{l'0}(\Omega') \quad (17)$$

ahol

$$I(lk, l'k_0) = \int f_l(k, r') w(r') r'^2 dr'$$

$f_l(k, r)$ és $f_l(k_0, r)$ a homogén egyenletek megoldásai.

és

$$w(r) = V_0 \frac{R_0}{4a} \frac{1}{\left[Ch \left(\frac{r-R_0}{a} \right) \right]^2} \quad (18)$$

A differenciális hatáskeresztmetszet:

$$\sigma(\Omega)_{00 \rightarrow JM} = \frac{k}{k_0} |f(\Omega)|^2 \quad (19)$$

A potenciál helyettesítésével a mátrix elem:

$$\langle \varphi_{JM} | V(r, \alpha) | \varphi_{00} \rangle = w(r) Y_{JM}^*(\Omega) \frac{\langle J | |\alpha_J^+| | 0 \rangle}{\sqrt{2J+1}} \quad (20)$$

és $\langle J | |\alpha_J^+| | 0 \rangle$ a redukált mátrix elem. Ezt behelyettesítve a szórási amplitúdó kifejezésébe:

$$\varphi_{00 \rightarrow JM}(\Omega) = -\frac{\langle J | |\alpha_J^+| | 0 \rangle}{\sqrt{2J+1}} \sum_{lm'} i^{l'-l} Y_{lm}(\Omega) \sqrt{4\pi(2l'+1)} J(lk, l'k_0) \cdot \int Y_{lm}^*(\Omega) Y_{JM}(\Omega') Y_{l'0}(\Omega) d\Omega' \quad (21)$$

$$I(l, k, l', k_0) = \int f_l(kr') w(r') f_{l'}(k_0 r') r'^2 dr' \quad (22)$$

Mivel a végmag beállása tetszés szerinti lehet, a mérhető hatáskeresztmetszet felírásánál M -re összegezni kell:

$$\begin{aligned} \sigma_{0 \rightarrow J}(\theta) &= \frac{k}{k_0} \sum_M |f_{00 \rightarrow JM}(\Omega)|^2 = \\ &= \frac{k}{k_0} |\langle J | |\alpha_J^+| | 0 \rangle|^2 \sum_M \left| \sum_{ll'} i^{l'-l} \sqrt{2l+1} (lMj-M | l'0) I(lk, l'k_0) Y_{l-M}(\Omega) \right| \end{aligned} \quad (23)$$

Tehát a hatáskeresztmetszet két tényezőből tevődik össze: az első a $|\langle J | |\alpha_J^+| | 0 \rangle|^2$ redukált mátrix elem a mag gerjeszthetőségére jellemző paramétereket tartalmazza, a másik a szórt neutronra vonatkozik és lényegében annak a szögeloszlását adja meg.

Érdekes, hogy a $\langle J | \alpha_J^+ | 0 \rangle^2$ „gerjeszthetőségnek” egyszerű geometriai jelentése is van, amelyet a $J=2$ kvadrupól deformáció speciális esetére mutatunk meg.

A

$$\Delta R(\Omega, \alpha) = R_0 \sum_{\mu} \alpha_{2\mu} Y_{2\mu}(\Omega)$$

függvény a magfelület egyenletlenségét, gömbszimmetriától való eltérését írja le. Ennek várható értéke

$$\langle 0 | [\Delta R(\Omega, \alpha)]^2 | 0 \rangle$$

pedig a magfelület diffuzitása, amelynek oka a magfelület fluktuációja az alapállapotban. A diffuzitás a következő módon alakítható át:

$$\langle 0 | [\Delta R(\Omega, \alpha)]^2 | 0 \rangle = R_0^2 \sum_{\mu\mu'} \langle 0 | \alpha_{2\mu} \alpha_{2\mu'}^+ | 0 \rangle Y_{2\mu}(\Omega) Y_{2\mu'}^*(\Omega)$$

De

$$\begin{aligned} \langle 0 | \alpha_{2\mu} \alpha_{2\mu'}^+ | 0 \rangle &= \sum_m \langle 0 | \alpha_{2\mu} | 2m \rangle \langle 2m | \alpha_{2\mu'}^+ | 0 \rangle = \delta_{\mu\mu'} \langle 0 | \alpha_{2\mu} | 2\mu \rangle \langle 2\mu | \alpha_{2\mu}^+ | 0 \rangle = \\ &= \delta_{\mu\mu'} |\langle 2\mu | \alpha_{2\mu}^+ | 0 \rangle|^2 = \delta_{\mu\mu'} |\langle 2 | \alpha_2^+ | 0 \rangle|^2 \end{aligned}$$

Ezért

$$\frac{\langle 0 | [\Delta R(\Omega, \alpha)]^2 | 0 \rangle}{R_0^2} = |\langle 2 | \alpha_2^+ | 0 \rangle|^2 \sum_{\mu\mu'} \delta_{\mu\mu'} Y_{2\mu} Y_{2\mu'}^*$$

A gömbfüggvényekre vonatkozó összeg kiszámítható:

$$\sum_{\mu} Y_{\lambda\mu}(\Omega) Y_{\lambda\mu}^*(\Omega) = \frac{2\lambda + 1}{4\pi}$$

Ezért

$$|\langle 2 | \alpha_2^+ | 0 \rangle| = \frac{4\pi}{5} \frac{\langle 0 | [\Delta R(\Omega, \alpha)]^2 | 0 \rangle}{R_0^2} \quad (24)$$

A gerjeszthetőséget leíró mátrix-elem tehát a magfelület relatív diffuzitásával arányos, pontosabban a relatív diffuzitás azon részével, amelyet a magfelület alapállapotú fluktuációja okoz. Az a tény, hogy a mag gerjeszthetősége ilyen egyszerű kapcsolatban van a mag geometriai tulajdonságával, annak a következménye, hogy adiabatikus közelítést alkalmaztunk.

Az előzőekben vibrációs gerjesztésről beszéltünk. A számítás hasonlóan végezhető el rotációs nívó esetére. Eredményül azt kapjuk, hogy a (23) képlet továbbra is érvényes: a gerjesztési mátrix-elemet továbbra is a (24) képlet adja meg. Ezért (n, n') mérések nem alkalmasak annak eldöntésére, hogy egy 2^+ -os nívó vibrációs vagy rotációs gerjesztése-e a magnak. A két eset közötti egyedüli különbség az, hogy (24) jobb oldalán fellépő relatív diffuzitást nem a magfelület vibrációja, hanem a mag rotációja okozza. Egy adott β^2 deformációs paraméterrel jellemzett magalakra a relatív diffuzitás egyszerű módon kiszámítható, mert alapállapotban a szimmetria-tengely egyenlő valószínűséggel mutat minden irányba. Így azt kapjuk, hogy

$$\frac{\langle 0 | [\Delta R(\Omega, \alpha)]^2 | 0 \rangle}{R_0^2} = \frac{5}{4\pi} \beta^2$$

azaz

$$|\langle 2 | \alpha_2^+ | 0 \rangle|^2 = \beta^2 \quad (25)$$

Elektromágneses átmenetek esetén annak a valószínűsége, hogy az I_i impulzusmomentum kezdeti állapotból a mag az I_f végállapotba σ típusú (elektromos vagy mágneses) λ -ad rendű átmenettel menjen át:

$$T(\sigma, \lambda) = \frac{8\pi(\lambda+1)}{\lambda[(\lambda+1)!!]} \frac{K^{2\lambda+1}}{h} B(\sigma, \lambda; I_i \rightarrow I_f)$$

ahol $B(\sigma, \lambda; I_i \rightarrow I_f)$ a redukált átmeneti valószínűség. Egyszerű közelítő számítással $I_i=0$ esetre, elektromos átmenetre:

$$B(J) = \left(\frac{3zeR_0^J}{4\pi} \right)^2 \beta_J^2$$

ahol β_J a deformációs paraméter.

Mivel $B(J)$ mérhető Coulomb-gerjesztéssel és elektronszórással, ezért az (n, n') mérésekből származó β_J -vel való összehasonlításra elég pontos értékek állnak rendelkezésre.

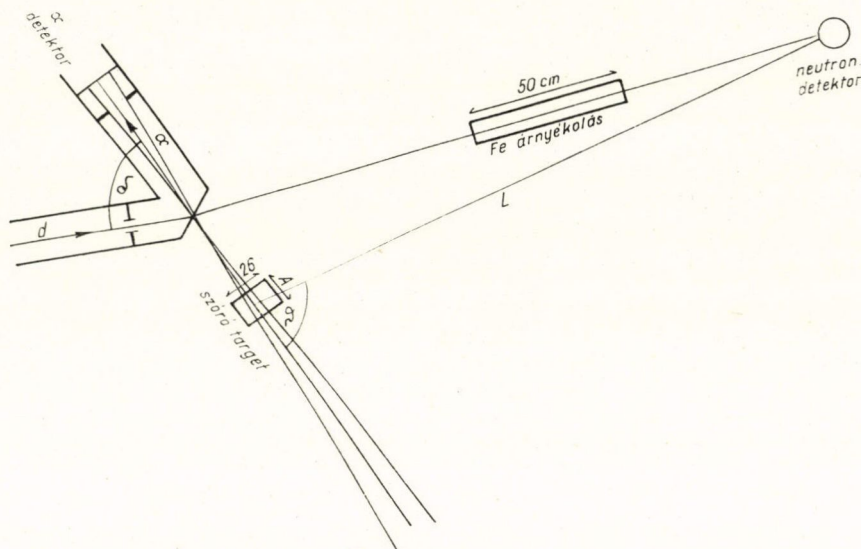
A félreértések elkerülése végett megjegyezzük, hogy a rugalmatlan szórásra vonatkozó mérések célja nem a deformációs paraméter meghatározása. Ezek a mérések ui. mindig pontatlanabb értéket szolgáltatnak a deformációs paraméterre, mint a közvetlenül elektromágneses kölcsönhatáson alapuló jelenségek. A kísérletek célja a reakciómechanizmus vizsgálata, amelynek egyik lépése a deformációs paraméterrel történő összevetés.

3. §. A rugalmatlan szórás mérése ^{32}S és ^{56}Fe magokon

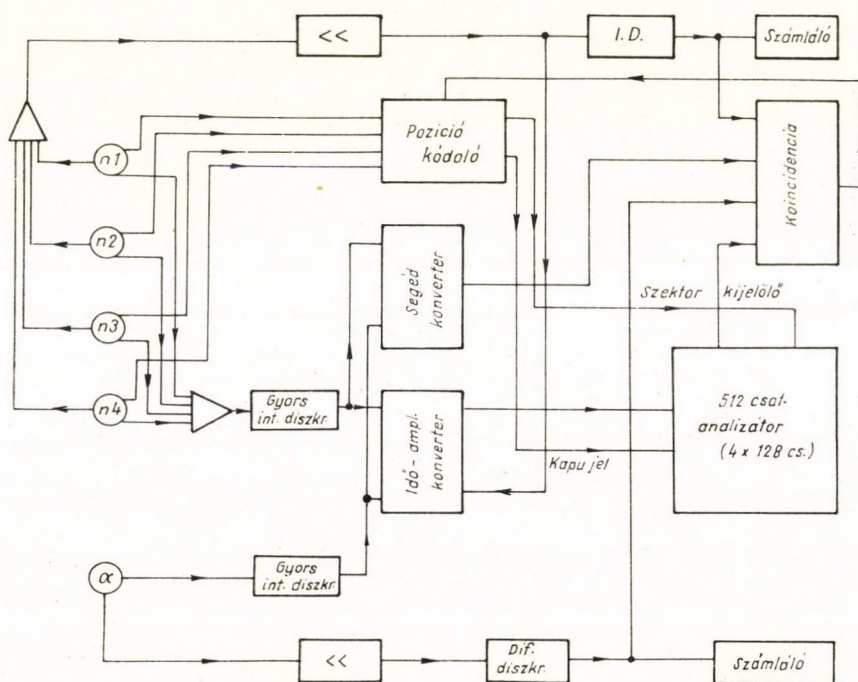
A kísérleti feladat a vizsgált targeten szórt neutronok szögeloszlásának és energiaspektrumának meghatározása. A repülési idő spektrumokat négy neutron-detektorral egyszerre négy szöghelyzetben mértük. A kísérleti elrendezés és a regisztráló-berendezés lényegében megegyezett azzal, amit a VI. 3. §-ban tárgyalt kísérletnél alkalmaztunk.

A gyorsító és a detektorok elhelyezése a 60. ábrán látható. A szcintillátorokat a direkt neutronoktól leárnýekoltuk 50 cm hosszúságú vassal, a gamma háttér ellen pedig körülvettük 2,5 cm vastagságú ólommal. Időfelbontásunk a repülési csúcs helyzetének elmozdása miatt hosszú regisztrálási időre (1,5—1,6) m μ sec volt. Ez három méter repülési távolságon 14 MeV energián ~5%-os energiafelbontást eredményez. A szögfelbontást nagyrészt az alfadetektor szabta meg: $\Delta\theta = \pm 8^\circ$. L repülési távolságot úgy kellett megválasztani, hogy az adott felbontás mellett a targetről rugalmasan szórt 14 MeV energiájú és a rugalmatlanul szórt (14— Q) MeV energiájú neutronokat biztonsággal szétválaszthassuk. Ehhez vas esetében 4 méter, a kénél pedig 2,5 méter repülési távolságot kellett biztosítani.

Az alfadetektort a trícium-targettől a vasmérésnél 6 cm-re, a kén mérésénél 10 cm-re helyeztük. Mindkét mérésnél az alfadetektort a szórótargetnek megfelelő alakú és méretű ablakkal blendéztük. A szórótargetet a neutronforrástól 10 cm távolságban helyeztük el. Lineáris méretei $\lambda_{\text{totális}}/4$ és $\lambda_{\text{totális}}/2$ között voltak. Különösen a vas-mérésnél a nagy repülési távolság és a hatáskeresztmetszet kis értéke miatt fontos volt, hogy nagy szórótarget méreteket alkalmazzunk. Ezért a kétszeres szórásra a kiértékelésnél korrekciót hajtottunk végre.



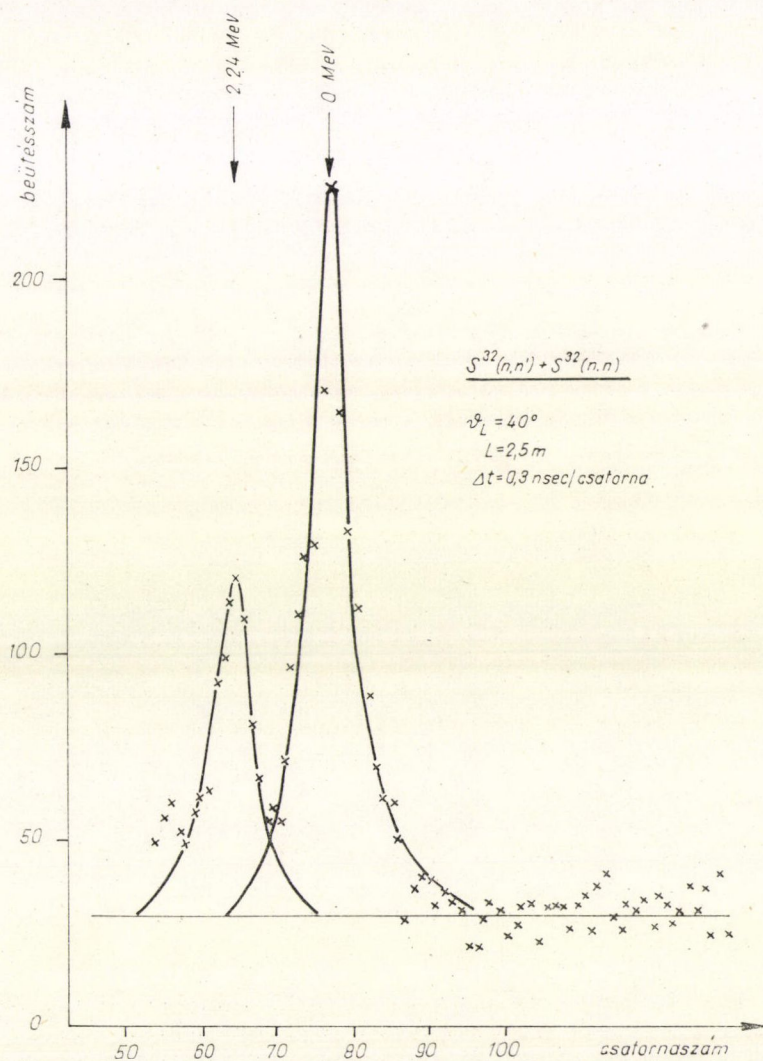
60. ábra. A target és a detektorok helyzete ^{32}S és ^{56}Fe (n, n') differenciális hatáskeresztmetszet mérésénél. δ a deutériumnyaláb és a visszalökött α -k szöge. $\delta = 30^\circ$ a ^{32}S mérésénél és $\delta = 90^\circ$ a ^{56}Fe mérésénél



61. ábra. Négy detektoros repülési idő spektrométer blokk-sémája

A regisztráló berendezés blokk-sémája a 61. ábrán látható. Ez abban tér el attól, amit korábban használtunk, hogy itt már a III. 11. §-ban tárgyalt sokdetektoros rendszer elektronikus egységeit használtuk, nem utolsósorban azért, hogy tapasztalatokat szerezzünk és kipróbáljuk azokat.

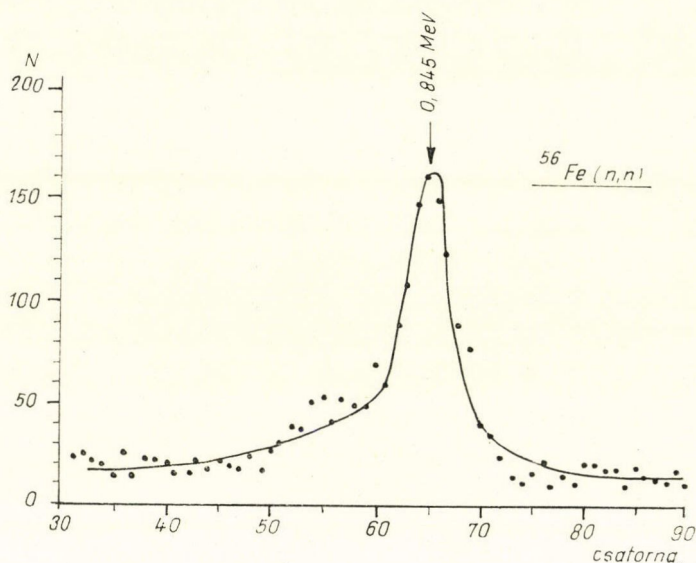
Az egyes neutron-detektorokból három-három, az alfadetektorból pedig két jelet vezettünk ki: Egyet, az analóg jelet, amely közelítőleg arányos volt a meglökött proton energiájával, amplitúdó arányosan erősítettünk, egy másikat, mely az időmérés céljait szolgálta, néhány m μ sec fölfutású, 100 m μ sec hosszúságú digitális



62. ábra. Repülési idő spektrum ^{32}S target esetében

jellé formáltuk. Tekintve, hogy mind az analógjelet, mind a digitális jeleket egy-egy közös „vagy” kapuval egyesítettük, a harmadik kivezetett detektorjelet pozíciókódolóba vezettük, ami biztosította az analizált jeleknek a detektorok szerinti szétválasztását.

Az alfadetektor analóg jelét erősítés után differenciál diszkriminátorba vittük, amelyet a 3,5 MeV energiájú alfa impulzusok kapuzására állítottuk be. A kimenőjeleket szkélerral számoltuk. Ez szolgálta a hatások megállapítását, illetve a monitorozást, másrészt ezeket a jeleket háttérszűkítés céljából a koincidencia fokozatba is bevezettük. A „vagy” kapuval egyesített digitális jelet, valamint az alfa digitális jelét az idő amplitúdó konverterbe vezettük. A konverter jeleket egy 512 csatornás analizátorban tároltuk, amely 4 db független 128 csatornás analizátorként működött. A pozíció kódolóból bevezetett kapujel gondoskodott arról, hogy az impulzusok a megfelelő szektorba tárolódjanak.



63. ábra. Repülési idő-spektrum ^{56}Fe esetében.
A csúcs szélessége félmagasságban $2\tau \approx 1,6$ musec

A 62. ábrán egy tipikus repülési idő spektrumot mutatunk be ^{32}S esetében, amely 52 óra regisztrálási időre vonatkozik. A 63. ábra egy vasra vonatkozó mérést tartalmaz, itt a regisztrálási idő 100–150 óra. A vas esetében a gamma csúcs nem látszik, mert az időskála nagy nyújtása miatt már kívül esik a legszélső csatornán.

A kiértékelésnél feltételeztük, hogy a ^{32}S 2,24 MeV-es és a ^{56}Fe 0,845 MeV nivói ideális vibrációs állapotok.

A numerikus számításokat a ^{32}S -re először Saclayban végeztük el IBM 6060 számológépen. Az optikai modell paramétereit egy keresőprogram alkalmazásával nyertük. A program neve SEEK, készítője Melkanoff [Me66]. A csatornacsatolásos program neve JUPITOR—1, készítője Tamura [Ta67]. A számított rugalmas hatás-

keresztmetszet görbéket a kísérleti adatokkal együtt a 64. ábra, az (n, n') görbéket a 65. ábra tartalmazza.

Az elméleti görbék illesztése a kísérleti adatokhoz a következőképpen történt:

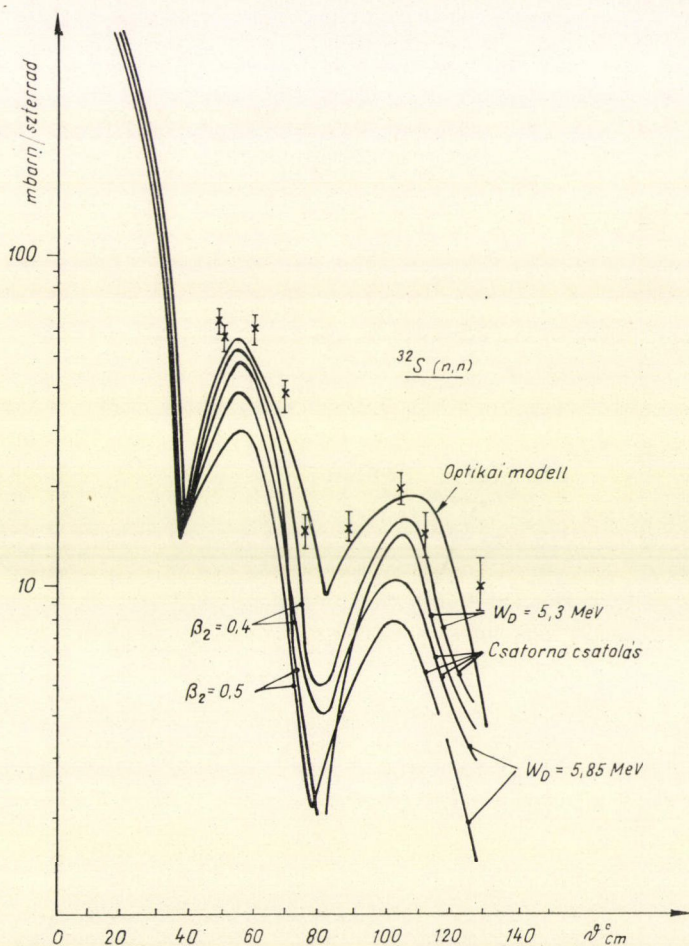
1. A SEEK-program segítségével a kísérleti rugalmas szórás hatáskeresztmetszet adatokhoz meghatároztuk az optikai potenciál paramétereit. A kapott paraméterek:

$$V = 50 \text{ MeV} \quad a_V = 0,564 \text{ f} \quad r_0 = 1,25 \text{ f}$$

$$W = 0,0 \text{ MeV} \quad a_D = 0,741 \text{ f} \quad r_0 = 1,25 \text{ f}$$

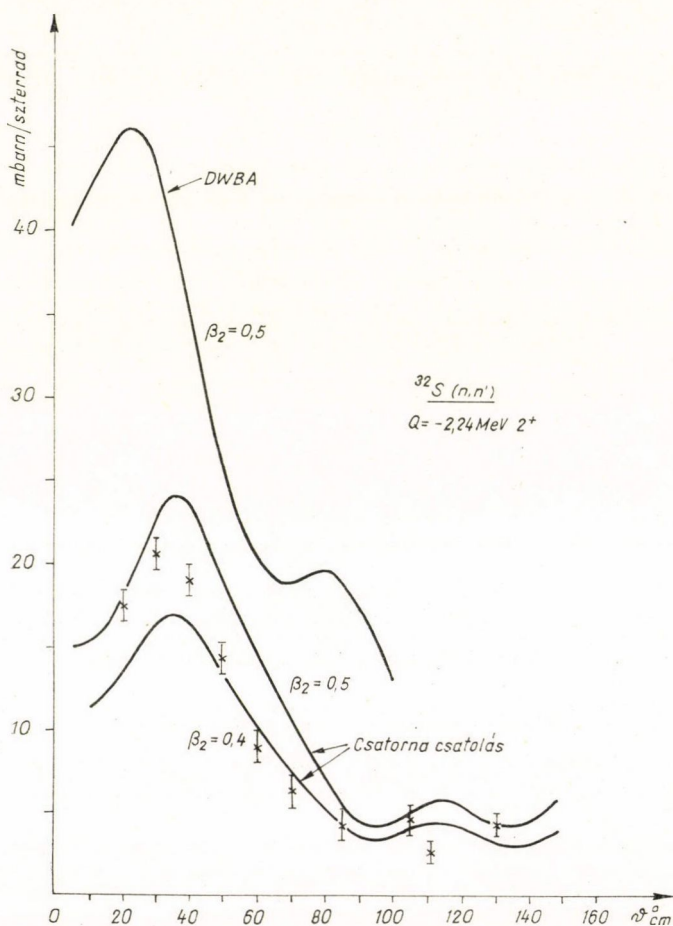
$$W_D = 5,85 \text{ MeV} \quad a_{SO} = 0,547 \text{ f} \quad r_0 = 1,25 \text{ f}$$

$$V_{SO} = 15,7 \text{ MeV}$$



64. ábra. Az ^{32}S (n, n') rugalmas szórás kísérleti adatai és a számított differenciális hatáskeresztmetszet-görbék

2. A JUPITOR—1 programhoz elkészítettük az adatkártyákat a 2,24 MeV nivóra a kísérletileg meghatározott hatáskeresztmetszet adatokból és a SEEK-programmal előállított optikai modell paramétereiből. A programot először az elektromágneses átmenetekből meghatározott $\beta_2=0,23$ értékkel futtattuk le. Az így nyert rugalmas szórási hatáskeresztmetszetek alacsonyabbak, mint a kísérleti értékek. Ez érthető, hiszen a rugalmatlan folyamatot kétszer vettük figyelembe: egyszer azért, hogy a csatornacsatolásos számítás alkalmaztuk és másodszor közvetlenül a potenciál imaginárius részén keresztül, amely abszorpciónak felel meg. Ezért a potenciál imaginárius részének mélységét csökkentettük (64. ábra görbéi).
3. A JUPITOR-programot a módosított potenciállal futtattuk különböző β_2 értékek esetén. Az inelasztikus kísérleti pontokhoz $\beta_2 = 0,4—0,5$ értékkel



65. ábra. Az $^{32}\text{S} (n, n')$ 2,24 MeV 2^+ nivójára mért adatok és a számított differenciális hatáskeresztmetszet-görbék

érhető el illesztés. Ekkor a rugalmas görbe is közelebb van a mérési pontokhoz, ill. a SEEK-programmal meghatározott eredeti illesztéshez. Végül is a legjobb illesztést a következő paramétereknél érték el:

$$V = 50 \text{ MeV} \quad a_V = 0,567 \text{ f} \quad r_0 = 1,25 \text{ f}$$

$$W = 0,0 \text{ MeV} \quad a_D = 0,741 \text{ f} \quad r_0 = 1,25 \text{ f}$$

$$W_D = 4,0 \text{ MeV} \quad a_{SO} = 0,650 \text{ f} \quad r_0 = 1,25 \text{ f} \quad \beta_2 = 0,4-0,5$$

$$W_{SO} = 8,3 \text{ MeV}$$

A 65. ábrán a DWBA számítás eredményeit is feltüntettük. Ez a számítás természetesen a nem módosított $W_D = 5,85 \text{ MeV}$ potenciál adattal történt. Az összehasonlításból kitűnik, hogy az állapotok közötti csatolás intenzív, a rugalmas és rugalmatlan szórás nem kezelhető egymástól függetlenül, a DWBA közelítés már nem kielégítő.

A JUPITOR-programot *Deák Ferenc* írta át az Intézetünkben működő ICT számológép Fortran utasításainak megfelelően és némileg módosította, hogy a gép memóriájában elférjen. Ezáltal lehetőségünk nyílt a kiértékelést itthon megismételni, ami a Saclay futtatással azonos eredményre vezetett.

A vas kiértékelése itthon történt az ICT számológépen. Először a mért rugalmas szögeloszlások illesztésével az optikai potenciál paramétereit kerestük meg a csatornacsatolós programmal. Az így kapott paraméterek:

$$V = 44,0 \text{ MeV} \quad a_V = 0,65 \text{ f} \quad r_0 = 1,25 \text{ f}$$

$$W = 0,0 \text{ MeV} \quad a_D = 0,47 \text{ f} \quad r_0 = 1,25 \text{ f}$$

$$W_D = 9,0 \text{ MeV} \quad a_{SO} = 0,47 \text{ f} \quad r_0 = 1,25 \text{ f}$$

$$V_{SO} = 7,0 \text{ MeV}$$

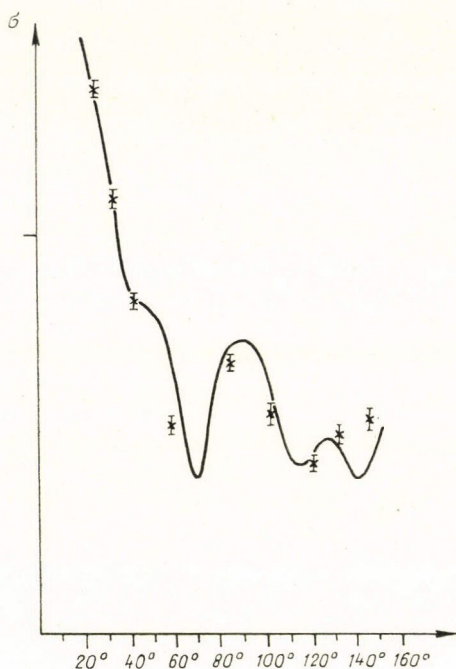
Ezekkel az értékekkel futtattuk a rugalmatlan szórást is figyelembe vevő Tamura-programot. Ekkor már csak β_2 változtatásával illesztettük a rugalmatlan szögeloszlást. Pontosabban, miután a számításban a gerjesztett kollektív nívó hatása automatikusan szerepel, nehogy e nívó hatását kétszer vegyük figyelembe, W_D értékét csökkenteni kellett: $W_D = 7,5 \text{ MeV}$ értékre. A vasmérés kiértékelésénél nyert legjobb illesztések görbéit a 66. és 67. ábrák tartalmazzák.

A ^{56}Fe targeten *Buck* [Bu63] (p, p') mérést végzett. Az általa kapott deformációs paraméter érték ugyancsak jól megegyezik az elektromágneses átmenetekből kapottakkal. Később csatornacsatolós számításokat is végzett konstans deformáció feltételezésével és azt találta, hogy nincs lényeges különbség a vibrációs, illetve rotációs nívóra számolt rugalmatlanul szórt proton szögeloszlások között.

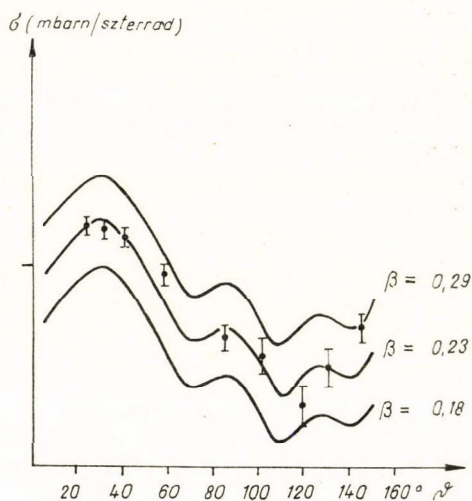
Hasonló számításokat mi is végeztünk (n, n') esetére és Buck-hoz hasonlóan lényegtelen különbséget kaptunk vibráció vagy rotáció esetére. Az általunk kapott

deformációs paraméter értékek [A71a] összehasonlítása az elektromágneses átmenetekből kapottakkal:

	Mi mérésünk	Elektromágneses átmenetből
^{32}S	0,35	0,38
^{56}Fe	0,23	0,23



66. ábra. $^{56}\text{Fe}(n, n')$ rugalmas szórás kísérleti adatok és elméleti görbe illesztése csatornacsatolások program segítségével



67. ábra. $^{56}\text{Fe}(n, n)$ 0,845 2^+ nivójára mért differenciális hatáskeresztmetszet adatok és a számított görbék csatornacsatolások programmal

Az I. táblázatban (n, n') és (p, p') mérésekből meghatározott β_2 deformáció paramétereket tüntettünk fel. A táblázatot az irodalom alapján főleg [Cl64] és [St65] felhasználásával állítottuk össze. Összehasonlításképpen feltüntettük az EM átmenetekből kapott β_2 értékeket is. A 6. oszlopban levő betű az (n, n') , ill. (p, p') mérés kiértékelésének módjára utal: (D) DWBA, (C) csatornacsatolás.

Összefoglalóan megállapíthatjuk, hogy a 2. §-ban ismertetett elmélet segítségével a mért szögeloszlások alakja kielégítően értelmezhető. A deformációs paraméter összhangban van az elektromágneses átmenetből ismert értékkel. Aláhúzzuk, hogy már a nagyságrendi egyezés is sokat mondana, hiszen a nukleon-nukleon kölcsönhatás rövid hatótávolsága miatt még az sem volt triviális, hogy a kollektív állapotokra jellemző paraméter egyáltalán megjelenik a neutronszórás leírásában

ilyen közvetlen módon. Hozzáteszük még, hogy a reakciómechanizmusra vonatkozó meggyőző bizonyítékot csak a periódusos rendszer egészére vonatkozó mérési sorozat analízise adhat.

II. TÁBLÁZAT

Mag	Q MeV	J, π	β_2 (n, n)	β_2 (p, p)	D/C	β_2 EM
^{12}C	4.43	2^+	0.82		D	0.59
^{24}Mg	1.37	2^+	0.62		D	0.66
			0.53		C	
^{27}Al	0.84	$1/2^+$	0.23		D	0.18
	1.01	$3/2^+$				
^{27}Al	2.21	$7/2^+$	0.26		D	0.23
^{28}Si	1.78	2^+	0.43		D	0.40
			0.40		D	
^{31}P	2.2	$5/2^+$	0.24		D	0.20
^{32}S	2.24	2^+	0.40		D	0.38
			0.32			
^{48}Ti	0.99	2^+		0.25	D	0.26
				0.26	C	
^{52}Cr	1.3	2^+	0.21	0.20	D	0.23
				0.20	C	
				0.19	C	
^{56}Fe	0.845	2^+		0.24	C	0.23
				0.21	C	
^{58}Ni	1.46	2^+	0.19	0.23	D	0.19
			0.22		D	
^{62}Ni	2.05	0^+		0.17	C	
^{62}Ni	2.30	2^+		0.23	C	
^{62}Ni	2.34	4^+		0.28	C	0.20
				0.23	C	
				0.22	C	
				0.20	C	
				0.20	C	
^{64}Ni	1.34	2^+		0.23	C	0.19
^{64}Ni	2.28	0^+		0.17	C	
^{64}Ni	2.62	4^+		0.23	C	
^{64}Ni	2.89	2^+		0.19	C	
^{64}Zn	1.0	2^+	0.23	0.22	D	0.24
				0.23	C	
				0.24	C	
^{66}Zn	3.3		0.23			
^{114}Cd	1.21	2^+		0.17	C	
^{124}Sn	1.13	2^+	0.12		D	0.11
Sb	1.1	2^+	0.10		D	

VIII. Köszönetnyilvánítás

Az a kutatómunka, amelyről ebben a disszertációban beszámoltam, egy kutatócsoport tevékenysége volt több mint 10 év folyamán. Bár a csoport mindvégig a szerző vezetése alatt dolgozott, és az egész tevékenységben mind a kezdeményező, mind az irányító szerep a szerző feladata volt, az eredményeket természetesen nem tekinthetem kizárólag saját eredményeimnek: közös erőfeszítés, kollektív munka közös eredménye. Ezúton kívánom hálámat kifejezni mindazoknak, akiknek közreműködése nélkül ez a munka nem valósult volna meg:

Elsősorban *Hraskó Péternek* és *Pállya Gabriellának*, akikkel az első perctől kezdve közösen dolgoztunk. Kiemelkedő szerepük volt a kollektíva munkájában és az elért eredményekben. *Pállya Gabriella* szerepe különösen az urán anomália tisztázásában volt döntő, tőle származik az a kérdésfelvetés, hogy esetleg az egész effektus a nem kielégítő optikai modell analízisnek tulajdonítható, és ő hajtotta végre a megfelelő optikai modell analízist.

Quittner Pálnak, aki az $(n, 2n)$ koincidencia kísérlet előkészítésében és lebonyolításában oroszlanrészt vállalt.

Hasonlóan *Deák Ferencnek* az (n, n') szóráskísérletek végrehajtásában való fáradhatatlanságáért és elsősorban a Tamura-program adaptálásáért az ICT számológépre, amely egyedül és kizárólag az ő érdeme.

Továbbá a csoport mindazon fizikus tagjainak, akik hosszabb vagy rövidebb ideig részt vettek a közös munkában, és egy vagy több eredményben társszerzők. Elsősorban *Jéki Lászlónak*, *Kecskeméti Józsefnek*, *Kiss Ádámnak* és *Koncz Pálnak*.

Veress Imrénnek és csoportjának a neutrongenerátor kiváló üzemeltetéséért és több mechanikus szerkesztési feladat megoldásáért, továbbá *Pásztor Endrének* a gyorsító csoport korábbi vezetőjének.

Szabó Lászlónak, *Kozma Gyulának* és *Lohonyai Lászlónak*, valamint az egész Méréstechnikai Laboratóriumnak az elektronikai feladatok átvállalásáért, a mérőrendszer fejlesztésében és üzemeltetésében végzett nagyszerű munkájukért.

A kutatókon kívül számos műszaki és adminisztratív beosztású kollégának is köszönettel tartozom, a csoportban végzett odaadó munkájukért, vagy a csoport ügyes-bajos ügyeinek szíves intézéséért. Itt elsősorban *Golen Károly* és *Fáthy Ferencné* kollégákat említeném.

Végül is és nem utolsósorban itt is kifejezem hálámat az elhunyt *Nagy Lászlónak*, aki nemcsak mint hivatali vezető, hanem elsősorban mint barát a közelmúltig szakadatlanul támogatott.

IRODALOM

- A60 Ádám A., Bod L., Szabó Z., Szeghő L., *Acta Physica Hungarica*, 12, 107, 1960.
- A62 Ádám A., Hraskó P., Pállya G., Quittner P., *KFKI Közl.* 10, 127, 1962.
- A63 Ádám A., Hraskó P., Pállya G., Quittner P., *Nucl. Phys.* 49, 489, 1963.
- A64 Ádám A., Pállya G., Quittner P., *PTE*, N°4, 93, 1964.
- A64a Ádám A., Pállya G., Pásztor E., Quittner P., *Nucl. Instr. and Meth.* 25, 365, 1964.
- A64b Ádám A., Pállya G., Quittner P., *PTE* N°4. 49, 1964.
- A64c Ádám A., Pállya G., Quittner P., *Acta Physica Hungarica*, 17, 353, 1964.
- A65 Ádám A., Kozma Gy., Quittner P., *Nucl. Instr. and Meth.* 37, 98, 1965.
- A66 Ádám A., Pállya G., Quittner P., *Acta Physica Hungarica*, 20, 227, 1966.
- A66a Ádám A., Pállya G., Hraskó P., *Phys. Letters*, 22, 475, 1966.
- A68 Ádám A., Jéki L., Pállya G., *KFKI Közl.* 16, 231, 1968.
- A68a Ádám A., Deák F., Hraskó P., Jéki L., Kiss Á., Kövesi Zs., Pállya G., *Acta Physica Hungarica*, 25, 261, 1968.
- A68b Ádám A., Deák F., Hraskó P., Jéki L., Kiss Á., Kövesi Zs., Pállya G., *Jagyernaja Fizika*, 8, 439, 1968.
- A69 Ádám A., Jéki L., *Acta Physica Hungarica*, 36, 335, 1969.
- A71 Ádám A., Pállya G., *Nucl. Instr. and Meth.* Előkészületben.
- A71 Ádám A., Deák F., Kiss Á., Kecskeméti J., Koncz P., Pállya G., *Nucl. Phys.* Előkészületben.
- A156 Alekszandrov Y. A., Bondarenko J. I., *ZsETF*, 31, 726, 1961.
- A157 Alekszandrov Y. A., Bondarenko J. I., *ZsETF*, 32, 115, 1957.
- A157a Alekszandrov Y. A., Bondarenko J. I., *ZsETF*, 33, 294, 1957.
- A161 Allan D. L., *Nucl. Phys.* 24, 274, 1961.
- Ale61 Alekszandrov Y. A., Anikin G. V., Soldatov A. S., *ZsETF*, 40, 1878, 1961.
- An65 Anikin G. V., Alekszandrov Y. A., Soldatov A. S., *Proc. of Int. Conf. Study of Nuclear Structure with Neutrons*, Antwerpen. 1965.
- As58 Ashby V. J. et al., *Phys. Rev.* 111, 616, 1958.
- Av67 Bar-Avraham E. et al., *Nucl. Phys.* B1, 49, 1967.
- Ba57 Bame S. J. et al., *Rev. Sci. Instr.* 28, 997, 1957.
- Ba61 Barr D. W., Brown G. I., Gilmore J. S., *Phys. Rev.* 123, 859, 1961.
- Ba64 Baldoni B., Saruis A. M., *Il Nuovo Cimento*, 33, 1145, 1964.
- Be52 De Benedetti S., Richings H. J., *Rev. Sci. Instr.* 23, 37, 1952.

- Be58 Benveniste J., Int. Conf. on the Peaceful Uses of Atomic Energy Geneva 1958. Vol 15. P. 2494 p. 3.
- Bj57 Björklund F., Fernbach S., UCRL-report, 4926, 1957.
- Bl52 Blatt J. M., Weisskopf V. F., Theoretical Nuclear Phys. John Wiley Sons, Inc., New York, 1952.
- Bl62 Blair J. S., Sharp., Willets L., Phys. Rev. 125, 1625, 1962.
- Bl65 Austern N., Blair J. S.: Annals of Physics 33, 1564, 1965.
- Bo65 Bormann M., Nucl. Phys. 65, 257, 1965.
- Bu63 Buck B., Stamp A. P., Hodgson P. E., Phil. Mag. 8, 1805, 1963.
- Ch60 Chase R. L., Rev. Sci. Instr. 31, 945, 1960.
- Ch63 Chatterjee A., Nucl. Phys. 47, 511, 1963.
- Cl64 Clark L. and Cross W. G., Nucl. Phys. 53, 177, 1964.
- Co58 Cohen B. L. et al., Phys. Rev. 111, 1568, 1958.
- Coo58 Coon J. H., Beyster J. R., Phys. Rev. 111, 250, 1958.
- Co59 Le Couteur K. J., Nuclear Reactions-North-Holland Pub. Comp. Amsterdam 1959.
- Cu65 Cuzzocrea P., Nattarigo S., Report INFN/BE 65/3.
- Cu67 Cuzzocrea P., Perillo E., Nucl. Phys. A103, 616, 1967.
- Cu67a Cuzzocrea P., Perillo E., Nattarigo S., Report INFN/BE 867/13.
- Cs67 Csikai J., Pető G., Acta Physica Hungarica, 23, 87, 1967.
- Du63 Dukarievics Y. V., Djumin A. N., ZsETF 44, 130, 1963.
- El66 Elwyn A. J., Monahan J. E., Lane R. O., Laogsdorf A., Mooring Jr. and F. P., Phys. Rev. 142, B 758, 1966.
- Er60 Ericson O., Proc. on Int. Conf. on Nucl. Structure Kingston 1960. p. 697.
- Ga62 Gardner D. G., Nucl. Phys. 29, 3737, 1962.
- Gy64 Gardner D. G., Yu-Wen Yu, Nucl. Phys. 60, 49, 1964.
- Ga67 Gardner D. G., Rosenblum S., Nucl. Phys. 96A, 121, 1967.
- Go67 Gorlov G. V., Lebedeva H. S., Morcosov B. M., Phys. Letters 25B, 197, 1967.
- Gr59 Grhule W., Nucl. Instr. and Meth. 4, 112, 1959.
- Ha52 Hauser W., Feshbach H., Phys. Rev. 87, 366, 1952.
- Hi68 Hille P., Nucl. Phys. A107, 49, 1968.
- Ho64 Howerton R. J. et al., Report UCRL 14 000, 1964.
- Ho68 Honecker R., Gräsler H., Nucl. Phys. A107, 81, 1968.
- Hr66 Hrasko P., Kövesi Zs., Acta Physica Hungarica, 20, 285, 1966.
- Il61 Ilakovac K. et al., Phys. Rev. Letters, 6, 356, 1961.
- Il63 Ilakovac K. et al., Nucl. Phys. 43, 254, 1963.
- Je63 Jeronimo I. et al., Nucl. Phys. 47, 157, 1963.
- Je65 Jessen P. et al., Compilation of Experimental Excitation Function of Some Fast Neutron Reactions up to 20 MeV, Hamburg, 1965.
- Ki54 Kiehn R. M., Coodman C., Phys. Rev. 95, 989, 1954.
- Ko60 Komarov V. V., Popova A. M., ZsETF, 38, 1824, 1960.
- Ko60a Komarov V. V., Popova A. M., ZsETF 38, 1559, 1960.
- Ko60b Komarov V. V., Popova A. M., ZsETF, 38, 253, 1960.
- Ko65 Kozma Gy., Quittner P., KFKI Közl. 13, 33, 1965.
- Le63 Levkovszkij V. N., ZsETF, 45, 305, 1963.
- Ma65 Manero F., Int. Conf. on the Study of Nuclear Structure with Neutrons, Antwerp. 1965. p. 120.
- Me66 Melkanoff M. A. et al., Nuclear Optical Model Calculations. Academic Press New York. 1966.
- Mi67 Minetti B., Pasquarelli A., Report PT-IN 43, 1967.
- Mo60 Moore R. G., Rev. Mod. Phys. 32, 101, 1960.
- Ne54 O'Neill G. K., Phys. Rev. 95, 1235, 1954.
- Ne60 Neszmélyi A., Pálka G., KFKI Közl. 8, 275, 1960.
- Pa70 Pálka G., Neutronok rugalmas szórásának vizsgálata nehéz magokon. Kandidátusi értekezés. 1970.
- Pe64 Pearlstein S., BNL 897 (T-365), 1964.
- Ra67 Rao P. V., Pink R. W., Phys. Rev. 154, 1023, 1967.
- Re62 Rethmeier B. V. et al., Nucl. Instr. and Meth. 17, 273, 1962.
- Re65 Redmond R. F., Phys. Rev. 140, B. B. 1265, 1965.
- Ri58 Ribakov B. V., Szidorov B. A., Szpektrometrija Büsztrich Nejtronov, Moszkva, 1958.

- Ri65 *Rieder R.*, Int. Conf. on the Study of Nuclear Structure with Neutrons, Antwerp. 1965. p. 123.
- Ro57 *Rosen L., Stewert L.*, Phys. Rev. 107, 824, 1957.
- Sa61 *Satchler G. R., Pinkston V. T.*, Nucl. Phys. 27, 270, 1961.
- St62 *Strohal P., Ciudro N., Eman B.*, Nucl. Phys. 30, 49, 1962.
- St65 *Stelson P. H., Satchler G. R.*, Nucl. Phys. 68, 97, 1965.
- Ta65 *Tamura T.*, Rev. Mod. Phys. 37, 679, 1965.
- Ta67 *Tamura T.*, Computer program JUPITOR-1. for Coupled Channel Calculations ORNL-4152. 1967.
- Vo65 *Voitovetskii V. K. et al.*, Nucl. Phys. 69, 513, 1965.
- Vo69 *Vojtenko V. A., Prokopec G. A., Sztrizsak B. J.*, Jad. Fiz. 9, 9, 1969.
- Wa65 *Walt M., Fossan D. B.*, Phys. Rev. 137, B629, 1965.
- We56 *Weinzierl P.*, Rev. Sci. Instr. 27, 226, 1956.
- Wi64 *Wilmore D., Hodgson P. E.*, Nucl. Phys. 55, 673, 1964.
- Wo67 *Wood R. E. et al.*, Phys. Rev. 154, 1108, 1967.
- Yu67 *Yu-Wen Yn, Gardner D. G.*, Nucl. Phys. A98, 451, 1967.

A kiadásért felel az Akadémiai Kiadó igazgatója

Műszaki szerkesztő: Helle Mária

A kézirat nyomdába érkezett: 1972. III. 8. Terjedelem: 11.90 (A/5 ív)

72-1179 – Szegedi Nyomda

**A MAGYAR
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
MATEMATIKAI ÉS FIZIKAI TUDOMÁNYOK
OSZTÁLYÁNAK
KÖZLEMÉNYEI**

Matematikai, fizikai, csillagászati dolgozatokat, referátumokat, könyvismertetéseket, a Tudományos Minősítő Bizottságnak a III. Osztályra vonatkozó híreit s a III. Osztály híreit közli. Évenként egy kötet (kb. 40 ív) jelenik meg (négy szám alkot egy kötetet).

A Közlemények előfizetési ára kötetenként, azaz évenként 60 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, Budapest V., Alkotmány u. 21. Pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11488, külföldi megrendelések a „Kultúra”

Könyv- és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat,
Budapest I., Fő utca 32.

(Pénzforgalmi jelzőszám: 218-10990 útján eszközölhetők.)

Ára: 10,— Ft
Előfizetés kötetenként: 48,— Ft

INDEX: 26 491

TARTALOMJEGYZÉK

	oldal
<i>Mezey Gábor: Channeling</i>	297
<i>Ladik János: Különböző LCAO MO módszerek általánosítása periodikus polimerek elekt- ronszerkezetének vizsgálatára</i>	323
<i>Ádám András: Kísérleti vizsgálatok 14 MeV energiájú neutronokkal</i>	335

307.226

0

MAGYAR

FIZIKAI FOLYÓIRAT

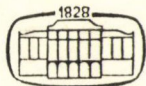
A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR,
PÁL LÉNÁRD ÉS SZALAY SÁNDOR
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI
JÁNOSSY LAJOS

XX. KÖTET

5. FÜZET



AKADÉMIAI KIADÓ
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
BUDAPEST 1972

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: BUDAPEST V., ALKOTMÁNY UTCA 21. SZ.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A klasszikus irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikkeket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10–10 dolgozat megjelenése után a folyóiratfüzetekről leválasztva, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóiratról évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 ív terjedelemben.

A kéziratok a következő címre küldendőek:

Jánossy Lajos akadémikus
Budapest, XII., Konkoly Thege út
Központi Fizikai Kutató Intézet

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként 48 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, Budapest, V., Alkotmány utca 21. pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11 248. külföldi megrendelések a „Kultúra” Könyv- és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat, Budapest, I., Fő utca 32. (Pénzforgalmi jelzőszám: 218-10 990) útján eszközölhetők.

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmi ismertetőt írjanak.
2. A levezetéseknek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közöljék. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázó szöveget írjanak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.

MAGYAR
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
KÖNYVTÁRA

IZOBÁR ANALÓG ÁLLAPOTOK GAMMA-BOMLÁSÁNAK VIZSGÁLATA AZ $A > 40$ TÖMEGSZÁM TARTOMÁNYBAN

FODOR ILONA

MTA Központi Fizikai Kutató Intézet, Budapest

Bevezetés

A nukleon-nukleon kölcsönhatás vizsgálatából az np és pp szórás kísérletek eredményeiből származott az a felismerés, hogy a nukleonok között ható erők töltésfüggetlenek. Ez azt jelenti, hogy az $n-n$ rendszerben fellépő nukleáris kölcsönhatás egyenlő a $p-p$ rendszerben megvalósulóval (töltésszimmetria) és ezen túl még az $n-p$ rendszerben kialakuló kölcsönhatással is megegyezik. Természetesen ez akkor igaz, ha a protonok közötti Coulomb kölcsönhatás és a neutron-proton tömegkülönbség elhanyagolható. Ilyen esetekben beszélhetünk általánosan nukleonról, és azt, hogy a nukleon neutron vagy proton töltésállapotban van a hozzárendelt izotópspin kvantumszámmal fejezzük ki. Neutronra $t_3 = \frac{1}{2}$ és protonra $t_3 = -\frac{1}{2}$.

Ennek a gondolatmenetnek a során eljuthatunk odáig, hogy nemcsak az egyes nukleonokra alkalmazzuk a töltésfüggetlenség feltevését, hanem bonyolultabb nukleon rendszerekre, azaz az atommagok állapotaira is. Ha ugyanis a rendszer Hamilton operátora töltésfüggetlen, akkor itt is bevezethetjük az új kvantumszámot, definiálhatjuk az illető állapot T izospinjét, amely jelen esetben mozgásállandó lesz, és ugyanolyan fontos jellemzője az állapotnak, mint az impulzusmomentum kvantumszám. Az állapotot az izospin értékével (T) és annak harmadik komponensével ($T_3 = \frac{N-Z}{2}$) jellemezhetjük. T_3 az adott mag minden állapotára azonos, a T érték

pedig a mag alap és alacsony gerjesztett állapotaiban megegyezik a $T_3 = \frac{N-Z}{2}$ értékkel.

Adott T értékhez a T_3 operátornak $2T+1$ különböző sajátértékű sajátfüggvénye tartozik. Ezek egy töltésmultipllett különböző állapotai, amelyek azonos tömegszám mellett különböző számú protont és neutronot tartalmazó állapotok. A töltésmultipllettekben található állapotok egymásnak izobár analóg állapotai. Egymásból neutron-proton cserével érhetők el.

Az impulzusmomentum kvantumszám és a paritás a töltésmultipllett minden tagjára azonos.

Ha a Coulomb energia hatásától eltekintünk, és a neutron-proton tömegkülönbséget is elhanyagoljuk, akkor az izobár multiplettek tagjait azonos energiáknál kell, hogy megtaláljuk. Ez valósul meg a könnyű magok tartományában. A magerők töltésfüggetlenségének szép bizonyítékai az itt talált töltésmultiplettek. (Pl. $^{10}_4\text{Be}$, $^{10}_5\text{B}$ és $^{10}_6\text{C}$ vagy $^{14}_6\text{C}$, $^{14}_7\text{N}$ és $^{14}_8\text{O}$.)

* Kandidátusi Értekezés. Érkezett 1972. ápr. 15.

A nehezebb tömegszámú magok tartományában a rendszám növekedésnek megfelelően a Coulomb energia erősen növekszik. Az $A > 50$ tömegszám értéknél már 10 MeV energia eltolódás is felléphet az izobár multipllett tagjai között. Így egy alap, vagy alacsonyban fekvő szülő állapotnak megfelelő izobár analóg állapot már a részecskebomlási küszöb fölé, a nem kötött állapotok tartományába esik. Nem várták tehát, hogy ezeket az állapotokat valamilyen módon megtalálják, kiválaszthassák a mellettük levő sok nívó tengeréből. Ilyen gerjesztési energiáknál a nehéz magok tartományában a nívósűrűség már olyan nagy, hogy ott egy nívó megtalálására a szomszédos nívóktól való elválasztására, hogy külön tanulmányozhassuk, nincs esély. Illetve 1961-ig az ilyen megfontolások alapján nem is várták, hogy izobár analóg állapotokat megtaláljanak $A > 40$ esetén. Ekkor fedezte fel ugyanis *Anderson és Wong* [1] a ^{51}V magon mért (p, n) reakciónál azt, hogy bár a kijövő neutronok energia eloszlása általában a statisztikus elméletnek engedelmessé válik a bombázó proton energia és a magon belüli gerjesztési energia függvényében, de egy bizonyos proton energiánál, egy jól meghatározott gerjesztési energiának megfelelő neutronok száma élesen megnő. A jelenség magyarázatára csak azt a feltevést lehetett elfogadni, hogy ezek a neutronok a magot a targetmag alapállapotának megfelelő, egyszerű szerkezetű analóg állapotban hagyták vissza. Azaz a magban éppen egy neutron—proton csere történt.

A (p, n) reakciókban az izobár analóg állapot mint végállapot jelent meg. További (p, n) reakció vizsgálatok során az izobár analóg állapotot gerjesztteni tudták közbenső magban is [2]. A (p, p) és (p, p') szórás kísérletekben mint rezonanciák jelentek meg a közbenső magban gerjesztett analóg állapotok, és ezek már a kontinuumban fekvő szórásállapotok a vizsgált tömegszám tartományban ($A \sim 90, \sim 140$), a megnövekedett Coulomb energia különbség miatt. Ennek megfelelően, ezeket izobár analóg rezonanciáknak (IAR) nevezzük.

A 60-as évek során egyre több kutató foglalkozott izobár analóg állapotok, illetve rezonanciák keresésével, hogy tulajdonságaikat megismerjék. Ezzel párhuzamosan indult fejlődésnek az elmélet is. Szükségessé vált a tapasztalatok rendszerezése és kvantitatív analízise.

A (p, n) reakcióban fellépő jelenségek leírására [3] *Lane* egy új tagot vezetett be az optikai modell potenciálba. A $V_1(t \cdot T)$ tényező, amely a bombázó nukleon (t) és a mag (T) izotópspin operátorát tartalmazza, magyarázatot tud adni a (p, n) típusú ún. kváziesztetikus szórásra.

Ha a *Lane* féle izotópspin függő kölcsönhatást explicit módon figyelembe vesszük a Hamilton operátorban, akkor a probléma normál Schrödinger egyenlete helyett csatolt differenciál egyenletekre jutunk. Ez a csatorna csatolt modell, amelyben a proton és neutron csatorna szoros kapcsolata tükröződik. A (p, p) szórásban észlelt analóg rezonanciák helyét és alakját kielégítően adja vissza. Több csatorna csatolódását figyelembe vevő számítások a (p, p') folyamatokról is számot tudnak adni.

Robson kidolgozott egy olyan elméletet [4], amely a magreakciók R -mátrix elméletén alapult és figyelembe vette, ha nem is explicit módon, a $(t \cdot T)$ -vel arányos kölcsönhatást. Ezzel nagyon szép sikereket ért el, a (p, p) és (p, n) mérésekben talált analóg rezonanciák alakjának és helyének kiszámításában. Az elmélet értékelése szempontjából igen fontos az, hogy a gerjesztési görbékben talált rezonanciák aszimmetrikus alakját is reprodukálni tudta. Az analóg rezonanciáknak tí. igen jellegzetes vonása ez az aszimmetrikus alak. A *Robson* féle elmélet magyarázni tudja egyúttal

azt a meglepő tényt is, hogy miért tudjuk az IAR-t önálló rezonanciaként észlelni olyan gerjesztési energia tartományban, ahol többszáz szomszédos rezonancia jelenléte miatt folytonos gerjesztési görbét várnánk. Pontos képet ad arról a feltevésről, hogy az izotópspin bizonyos mértékig jó kvantumszámmak tekinthető, mert ez akadályozza meg, hogy az izobár analóg állapot, amely $T_>$ izospin értékű, elkeveredjen a szomszédos ún. „háttér” állapotok sokaságában, amelyek viszont $T_<$ izospin értékkel rendelkeznek ($T_> = T_< + 1$). Ez a kitüntető tulajdonság teszi lehetővé számunkra, hogy ezeket az állapotokat a háttér állapotok tengerében mint önálló rezonanciákat megtaláljuk.

Néhány szerző az analóg állapotokat a kontinuumba ágyazott héjmodell állapotoknak képzi [5], ami sokszor bonyolult feladatokra vezet, és a probléma egyenes úton nem oldható meg, mint pl. a kontinuum állapotok diagonalizációja. Az ilyenfajta tárgyalások a Bloch-féle reakcióelmélet [6] nehézségeivel, illetve megszorításai-val küzdenek.

A Feshbach-féle elmélet [7, 8] a „doorway” állapot feltételezéssel, szintén alkalmasnak bizonyult az izobár analóg állapotok leírására. Itt a tér két részre bontva szerepel. Az egyik, a nyitott csatorna altér, amelyben a szórásállapot szerepel, a másik zárt csatorna, a bonyolult közbenső állapotok altere. A két rendszer közötti közlekedés a kétrészeske kölcsönhatás tulajdonságai miatt csak az ún. „doorway” állapoton keresztül lehetséges. A doorway állapotot a konfigurációk bonyolultság szerinti hierarchiájában az egyrészeske állapotok után következően kétrészeske egy lyukat tartalmazó állapotnak képzeljük el. Az izobár analóg állapotokat ill. rezonanciákat szemléletesen jelenleg is ezen elmélet alapján az egyrészeske gerjesztésből adódó konfiguráció mellett ilyen „doorway” szerkezettel komplikált állapotnak tételezzük fel.

Jelen dolgozatnak nem célja, hogy az izobár analóg rezonanciák elméleteit ismertesse, inkább csak az áttekintés kedvéért említettük meg röviden a fontosabb elmélet típusokat.

Az izobár analóg rezonanciák elméletét érintő kérdések csak olyan mértékben szerepelnek majd a dolgozatban, amennyire azok szükségesek a kísérleti eredmények értelmezéséhez.

Eddig az IAR protonnal vagy neutronnal való elbomlásáról beszéltünk. Igen lényeges azonban az a tény, hogy az izobár analóg rezonanciák megjelentek a (p, γ) reakciók gerjesztési görbéiben is [9, 10], ami további nagy területet nyitott meg a kutatás számára. Az izobár analóg állapotok, ill. rezonanciák γ bomlásának tanulmányozása újabb tapasztalatokkal bővíti ismereteinket, lényeges magszerkezeti információkat adhat az esetek nagy többségében, és ez nemcsak a nehéz magokban talált analóg állapotokra igaz. A könnyű magokban, a töltésmultiplettekbe tartozó állapotok γ bomlásait sokat vizsgálták, és sok érdekes következtetést vontak le az ottani kísérletekből mind a magszerkezet, mind az elektromágneses átmenetek tulajdonságait illetően. A nehezebb magokban észlelt elektromágneses átmenetek értelmezése nehéz a p vagy még az $s-d$ héjbeli magokkal szemben is. A konfigurációk bonyolultsága, a nívósűrűség megnövekedése mind olyan tényezők, amelyek megnehezítik az elektromágneses átmenetek áttekintését a nehezebb magok tartományában. Ezzel szemben az izobár analóg állapotok, amelyek lényegükben egyszerű szerkezetűek és ismert konfigurációjúak, igen nagy segítséget nyújtanak a közepes és nehezebb magok elektromágneses átmeneteinek tanulmányozásában.

Annak ellenére, hogy számos ilyen típusú mérést végeztek, köztük a dolgozat

szerzője és munkatársai, még mindig kevés a kísérleti adat ahhoz, hogy teljesen világos képünk legyen a különböző magtartományokban talált izobár analóg állapotok γ bomlásáról.

Egyik ilyen nyitott kérdés még jelenleg is annak a speciális M1-átmenetnek a létezése, amely az analóg állapotból a mag egy alacsonyan fekvő, ugyanolyan spinű, paritású, csak izospinben különböző, kötött gerjesztett állapotára vezet. Az $s-d$ héjban ez az átmenet majdnem minden esetben igen erős, míg az $f_{7/2}$ héj elején több nagyságrend tiltást észleltünk saját mérésekben [11] is, és találtunk a hasonló tárgyú dolgozatokban is [12]. Ezzel szemben a $2p_{3/2}$ héj elején a ^{59}Cu magban ismét erősen jelentkezett ez az M1 átmenet.

A dolgozatnak a témája az izobár analóg állapotok γ bomlásának vizsgálata az $f_{7/2}$ és a $p_{3/2}$ héjban található néhány magon. Ennek az M1 átmenetnek a viselkedését magyarázzuk a kísérleti adatok alapján felállított kvalitatív képpel, amely úgy tűnik elméletileg is alátámasztható, és héjmodell számításokkal reprodukálni lehet [13].

Először rövid áttekintést szeretnénk adni az elektromágneses átmenetek általános tulajdonságairól, majd bővebben tárgyalni az izotópspin szerepét az elektromágneses átmenetekben. Ezután a szülő-analóg-antianalóg állapotok szerkezetét, az analóg állapotok γ bomlását és az ebből levonható magszerkezeti és magspektroszkópiai következtetéseket tárgyaljuk.

Az $s-d$ héjban erősen jelentkező speciális M1 átmenetek vizsgálatát kiterjesztettük az $f_{7/2}$, $2p_{3/2}$ héjakra. A ^{44}Ca , ^{48}Ti és ^{58}Ni magokon tanulmányoztuk (p, γ) reakciókban gerjesztett analóg állapotok γ bomlását. Ezeket a méréseket és a belőlük levonható következtetéseket ismertetjük a dolgozat második felében.

Végül mérési eredményeink felhasználásával összefoglaljuk az M1 átmenetekre vonatkozó ismereteinket.

I. Izobár analóg állapotok elektromágneses tulajdonságai

A. Elektromágneses átmenetek

Az átmeneti erősség

Ha az atommag egy „ a ” kezdeti állapotból „ b ” végállapotba elektromágneses átmenettel jut el, akkor az átmenet erősségével arányos szélesség kifejezését az alábbi összefüggés adja meg:

$$\Gamma_\gamma(L) = 8\pi k \sum_{M, M_b} | \langle J_b M_b; T_b T_{3b} | H(L, M) | J_a M_a; T_a T_{3a} \rangle |^2, \quad (\text{I.1})$$

ahol a kölcsönhatási operátor:

$$H(L, M) = \int \frac{1}{c} \mathbf{j}_N(\vec{r}) \cdot \mathbf{A}_{LM}^*(k\vec{r}) d\tau. \quad (\text{I.2})$$

A_{LM} az elektromágneses tér vektor potenciálja, $\mathbf{j}_N(\vec{r})$ az áramsűrűség, amelynek részletes alakjára még visszatérünk, k az E_γ energiájú foton hullámszáma, $E_\gamma/\hbar c$, L az átmenet multipolaritása.

Az átmenetek erősségének kiszámításához legfontosabb, az (I. 1) összefüggésben a mátrixelem radiális integráljának ismerete. Ez nem könnyű feladat, mert ehhez szükséges lenne a kezdő és végállapot konfiguráció hullámfüggvényeinek pontos ismerete. Enélkül csak feltevésekre támaszkodhatunk, és modellek alapján határozzuk meg az átmeneti valószínűséget. A legismertebb ilyen közelítés az átmenetek erősségére a Weisskopf-féle becslés, amely az extrém egyrészecske modellen alapul [14]. Eszerint az elektromos átmenetek úgy jönnek létre, hogy egy proton mozog egy végtelen, töltés és spin nélküli potenciál gödörben, és a proton impulzusmomentumának az átmenetben való megváltozása éppen L a multipolaritás.

$$\Gamma_{\gamma W}(EL) = \frac{2(L+1)}{L[(2L+1)!]^2} \left(\frac{3}{3+L} \right)^2 \frac{e^2}{c} \left(\frac{\omega R}{c} \right)^{2L} \omega, \quad (\text{I.3a})$$

ahol $\omega = kc$.

Mágneses átmenetekre bonyolultabb a helyzet a nukleonok mágneses momentumai miatt. Ezt durván figyelembe véve kapjuk a mágneses átmenetekre érvényes összefüggést:

$$\Gamma_{\gamma W}(ML) = \frac{20(L+1)}{L[(2L+1)!]^2} \left(\frac{3}{3+L} \right)^2 \frac{e^2}{c} \left(\frac{\hbar}{McR} \right)^2 \left(\frac{\omega R}{c} \right)^{2L} \omega, \quad (\text{I.3b})$$

Az (I. 3a) és (I. 3b) összefüggésekben kifejezett szélességeket nevezzük az illető átmenetek Weisskopf becsléseinek. A kísérletekben mért sugárzási szélességeket rendszerint ezekhez az egyrészecske becslésekhez viszonyítva adják meg; azaz a $\Gamma_{\gamma}(\text{mért})/\Gamma_{\gamma}(\text{Weisskopf})$ mennyiséget [15]. A mért és az előre számított szélességek viszonya jellemző az átmenetben ténylegesen résztvevő konfigurációkra. Ha a mért szélesség nem tér el nagyon a Weisskopf becsléstől, akkor a feltevés szerint az átmenet egyrészecske átmenetnek tekinthető.

Sok esetben eltérést tapasztalunk az egyszerű képtől, mint pl. a kollektív gerjesztésekben felgyorsult E2 átmenetek esetén, amelyek erőssége nem egy esetben a Weisskopf egységek százszorosát is meghaladja, vagy ellenkezőleg vannak átmenetek, ahol az erősség több nagyságrenddel az egyrészecske becslés alatt marad. Ilyenkor az elektromágneses átmenetek erősségét a jelenségnek megfelelő elméletből kell kiszámítanunk az említett esetekben például a kollektív modell alapján, vagy az igen gyenge átmeneteknél pl. konfiguráció keveredést tartalmazó héjmodell számításból. Ha sikerül megtalálnunk a megfelelő képet, ill. modellt az átmenet leírására, akkor az átmenet jellegzetességeit reprodukálni tudjuk, és lényegének megértéséhez közelebb kerülünk. A modell számítások nem elégszenek meg azzal, hogy az atommagok gerjesztett állapotainak energia értékeit reprodukálják, hanem ezentúl az átmenetek erősségeit is kiszámítják. A mérési adatokkal összehasonlított értékek megerősítik vagy elvetik a modellben feltételezett konfigurációkat.

Kiválasztási szabályok

Ha az elektromágneses állapot igen gyenge, vagy egyáltalán nem létezik, azt nem minden esetben a konfigurációk bonyolultsága okozza. Gyakran valamilyen kiválasztási szabály tiltja meg az átmenetet.

1. Az átmenet multipolaritása, vagyis a γ sugárzás által elvitt impulzusmomen-

tum J_i impulzusmomentumú kezdeti állapot és J_f impulzusmomentumú végállapot esetén az alábbi vektor egyenlőtlenségnek tesz eleget:

$$|\vec{J}_i - \vec{J}_f| \leq L \leq |\vec{J}_i + \vec{J}_f|. \quad (\text{I.4})$$

2. Az átmenet során az impulzusnyomaték megmaradásán kívül a paritásnak is meg kell maradnia természetesen, és így a kezdeti és végállapot paritása dönti el az átmenet elektromos vagy mágneses jellegét.

3. Az elektromágneses átmenet a magban csak olyan kezdeti és végállapot között mehet végbe, amelyekre teljesül az, hogy a pályamomentum megváltozása az átmenet során egységnyi $l \rightarrow l \pm 1$. Ha ez nem teljesül, akkor l tiltott átmenetről beszélünk.

4. Az elektromágneses átmenetekre érvényesek ezenkívül még izotópspin kiválasztási szabályok, amelyeket a következő fejezetben részletesen fogunk tárgyalni.

B. Az izospin szerepe az elektromágneses átmenetekben

A mag áramsűrűség vektorát az alábbi összefüggés adja meg, ha feltételezzük, hogy az a nukleonok mozgásából és spinjéből adódik [16]:

$$\begin{aligned} \vec{j}_N(\vec{r}) = & \sum_p e_p \left[\frac{\vec{p}_p}{2M_p} \delta(\vec{r} - \vec{r}_p) + \delta(\vec{r} - \vec{r}_p) \frac{\vec{p}_p}{2M_p} \right] + \\ & + c \sum_p \mu_p \left(\frac{e\hbar}{2M_p c} \right) \nabla \times \vec{\sigma}_p \delta(\vec{r} - \vec{r}_p) + c \sum_n \mu_n \left(\frac{e\hbar}{2M_p c} \right) \nabla \times \vec{\sigma}_n \delta(\vec{r} - \vec{r}_n), \end{aligned} \quad (\text{I.5})$$

ahol a p és n index protonokat, illetve neutronokat jelöl, \vec{p} a megfelelő részecskék impulzusa, $\vec{\sigma}$ a spinje, a mágneses nyomatékok (μ) magmagnetonokban ($\mu_0 = \frac{e\hbar}{2M_p c}$) vannak megadva.

Ahhoz, hogy a kölcsönhatás izospin sajátosságait megkeressük, ezt az összefüggést izospin formalizmusban kell felírunk a fenti alak helyett. A τ_3 operátor $+1$ sajátértéke neutronoknak felel meg, míg -1 sajátérték protonokat jelöl. Ennek segítségével a $\vec{j}_N(\vec{r})$ vektor alapvetően két részre válik szét. Az egyik részt izovektor résznek nevezzük, ($j_N^{(1)}$), amely a τ_3 -tól lineárisan függ. A másik részében a kifejezésnek a τ_3 operátor nem lép fel, ez az izoskalár rész ($j_N^{(0)}$).

A kétféle típusú áramsűrűség vektort írjuk be az (I. 2) összefüggésbe és ezzel a kölcsönhatási operátorunk is két tagra bontható:

$$H_0(L, M) = \int \frac{1}{c} j_N^{(0)} A_{LM}^* d\tau,$$

a kölcsönhatás izoskalár része, és

$$H_1(L, M) = \int \frac{1}{c} j_N^{(1)} A_{LM}^* d\tau$$

az izovektor rész.

Igy az (I. 1)-ben szereplő mátrix elemünk:

$$\langle J_b M_b; T_b T_{3b} | H_0 + H_1 | J_a M_a; T_a T_{3a} \rangle$$

alakú lesz.

Ennek T_3 függésére alkalmazva a Wigner—Eckart teoremat, azt kapjuk, hogy:

$$\begin{aligned} & \langle J_b M_b; T_b T_{3b} | H_0 + H_1 | J_a M_a; T_a T_{3a} \rangle = \\ & = (-)^{T_b - T_{3b}} \begin{pmatrix} T_b & 0 & T_a \\ -T_{3b} & 0 & T_{3a} \end{pmatrix} \langle J_b M_b; T_b || H_0 || J_a M_a; T_a \rangle + \\ & + (-)^{T_b - T_{3b}} \begin{pmatrix} T_b & 1 & T_a \\ -T_{3b} & 0 & T_{3a} \end{pmatrix} \langle J_b M_b; T_b || H_1 || J_a M_a; T_a \rangle. \end{aligned} \quad (\text{I.6})$$

Itt a redukált mátrixelemek nem az impulzusmomentum függésre vonatkoznak, hanem az izospin függésre.

Az (I. 6) összefüggésből világosan látszik, hogy az átmenetet egy izoskalár és egy izovektor kölcsönhatás hozza létre. A Wigner együtthatókból pedig leolvashatók az elektromágneses átmenetekre vonatkozó izotópspin kiválasztási szabályok.

1. Elektromágneses átmenet csak olyan állapotok között lehetséges, amelyekre:

$$\Delta T = 0, \pm 1, \quad \Delta T_3 = 0.$$

(A $\Delta T = 0$ átmenetet létrehozhatja a kölcsönhatás izoskalár és izovektor része is, míg a $\Delta T = \pm 1$ átmenetekért az izovektor rész felelős.)

2. A konjugált magokban fellépő egyező típusú, $\Delta T = \pm 1$ átmenetek, minden tulajdonságukban meg kell hogy egyezzenek.

(Konjugált magoknak nevezzük azokat a magokat, amelyeknek a tömegszáma azonos, csak a T_3 értékük előjele ellentétes.)

A fenti két kiválasztási szabály nem a kölcsönhatás belső természetéből fakadt, hanem az izospin geometriájából, az együtthatók algebrai kifejezéseiből. Ha a kölcsönhatás konkrét szerkezetét vizsgáljuk adott átmenetek esetén, abból további törvényszerűségek vonhatók le. Az E1 átmenetek tanulmányozásából az adódik, hogy ilyen esetekben a kölcsönhatás izoskalár mátrixeleme zérus, mert a tömegközéppont mozgásának impulzus operátora szerepel egymásra ortogonális állapotok között. Tehát az E1 átmeneteket pusztán az izovektor kölcsönhatás okozza. Ebből újabb két fontos szabály következik.

3. E1 átmenetek konjugált magokban egyenlő erősségűek, tekintet nélkül arra, hogy $\Delta T = 0$ vagy $\Delta T = \pm 1$.

4. A $\Delta T = 0$, E1 átmenet a $T_3 = 0$ típusú magokban tiltott. (Ilyen magokban ti. a $\Delta T = 0$ átmenetek esetén az izovektor járuléka zérus, amint ez az izovektor rész Wigner együtthatójából leolvasható [16].)

A mágneses átmenetekre vonatkozó szabályok [17], sokkal közelítőbb jellegek, mint az elektromosak. Azon a tényen alapulnak, hogy a mágneses átmenetekre az izoskalár és izovektor operátorok nagyságrendben különböznek. Az izoskalár komponens egy nagyságrenddel kisebb, mint az izovektor rész, és így az esetek többségében elhanyagolható.

5. Konjugált magokban a $\Delta T = 0$, M1 átmenetek várhatóan azonos erősségűek, kb. egy kettes faktoron belül, ha az átmenetek erőssége az átlagos erősséget eléri

vagy erősebb. Ilyenkor ugyanis biztosan igaz az, hogy az izovektor rész dominál. (Az átlagos erősség az $5 \leq A \leq 40$ magtartományra vonatkozóan 0,38 Weisskopf egység [18].)

6. A $\Delta T=0$, $M1$ átmenetek a $T_3=0$ típusú magokban kb. 100-as faktorial gyengébbnek várhatók, mint az átlagos erősség.

Az 5. és 6.-hoz hasonló szabályok nyerhetők a magasabb multipolaritású mágneses átmenetekre is, ha a kölcsönhatás részletes alakját vizsgáljuk.

Végezetül meg kell jegyeznünk, hogy az itt felsorolt izotópspin kiválasztási szabályok lezármasztásánál végig feltételeztük, hogy az izotópspin jó kvantumszám. A szabályok egyrészének teljesüléséhez nem szükséges a töltésfüggetlenség feltételezése, elég, ha a töltésszimmetria kielégül. Ezeket az elveket eddig főként a könnyű magokra alkalmazták, ott keresték a példákat teljesülésükre is, és az $A > 40$ -es tömegszám tartományig általánosan elfogadott eligazító szerepet játszottak a magok elektromágneses átmeneteinek osztályozásában. Várhatjuk, hogy az izobár analóg állapotok γ bomlása során hasznosnak és alkalmazhatónak bizonyulnak a fenti szabályok a nehezebb magok körében is.

C. Szülő — Analóg — Antianalóg állapotok

Az izotópspin kvantumszám és az izospin keveredés

Az előbbi tárgyalás során az elektromágneses átmenetekre vonatkozó izotópspin kiválasztási szabályok levezetésénél feltételeztük, hogy az állapotok tiszta izospinnel rendelkeznek, most vegyük figyelembe azt a lehetőséget, hogy izospin keveredés is történhet bizonyos esetekben, és ez megváltoztatja az eddig egyszerű képet. Ha a nukleonok között ható erők szigorúan véve töltésfüggetlenek volnának, annak három egymástól független következménye lenne [19]:

1. Az izobár multiplettek energia szerinti degeneráltsága pontosan teljesülne.
2. Az összes stacionárius állapotok izospinje teljesen tiszta lenne.
3. Az izobár multiplett tagjainak tér és spin koordinátákat tartalmazó hullámfüggvényei egymásnak teljesen megfelelőek lennének. (Ez az izospinre vonatkozó ún. dinamikus érvényességi tétel.)

Az 1. következmény érvényét elronthatja bármely tér és spin koordinátától nem függő hatás, amely viszont töltésfüggő. Ilyen a neutron—proton tömegkülönbség. Ennek figyelembevétele főleg a stabil magok tömegértékeinek vizsgálatában fontos.

Egy mag izospin operátora definíció szerint:

$$T = \sum_{i=1}^A t^{(i)}$$

és egy tiszta izospinű állapotra $\Phi(T, M_T)$ az alábbi egyenletek érvényesek:

$$\begin{aligned} T^2 \Phi(T, M_T) &= T(T+1) \Phi(T, M_T), \\ T_3 \Phi(T, M_T) &= M_T \Phi(T, M_T) \end{aligned} \quad (1.7)$$

ahol $M_T = \frac{N-Z}{2}$, ami mindig jó kvantumszám. A T érték viszont csak akkor jó

kvantumszám, ha az izospin operátor négyzete kommutál a teljes Hamilton operátorral.

Ha a Hamilton operátort két részre tudjuk bontani, úgy hogy

$$H = H_0 + H_T$$

ahol H_0 kommutál a T^2 -el, de H_T nem, továbbá H_T elég kicsi ahhoz, hogy a perturbáció számítás érvényben legyen, akkor az izospin keveredés a következőképpen fogalmazható meg. Izospin keveredésről akkor beszélünk, ha a H_T operátornak vannak nem zérus, izospinben „off-diagonális” mátrix elemei olyan állapotok között, amelyek energiában közel fekszenek egymáshoz.

A töltésfüggetlenség harmadik következménye lenne az izospin dinamikus érvényessége. Ez azokra az összefüggésekre vonatkozik, amelyek egy izobár multipllett tagjai közötti kapcsolatot írnak le. Izospin növelő és csökkentő operátorok bevezetésével felírhatjuk, hogy hogyan érhetjük el az izobár multipllett állapotait egymásból.

$$T_{\pm} \Phi(T, M_T) = \sqrt{T \mp M_T} (T \pm M_T + 1) \Phi(T, M_T \pm 1). \quad (I.8)$$

Ennek az összefüggésnek teljesülése a valódi magállapotokra az izospin kvantumszám dinamikus érvényességének mértéke. Előfordulhat azonban, hogy bár az állapotok tiszták izospinben, de az (I. 8) nem teljesül, mert a H_T -nak izospinben diagonális mátrix elemei erősen függenek T_3 -tól [20]. A fordított eset számunkra érdekesebb. A (I. 8) összefüggés teljesülhet olyan állapotok között, amelyekre az izospin kevert. A $T_{\pm} \Phi(M_T)$ és $\Phi(M_T - 1)$ állapotokra nagy az „átfedés”, és ez különösen az analóg állapotok vizsgálatánál jelentős.

A Coulomb kölcsönhatás létében kell keresnünk annak fő okát, hogy az izospin kvantumszám nem tökéletes. Alakjából is világosan látszik, hogy megsérti a töltésinvarianciát:

$$V_C = \sum_{i>j} \frac{1}{4} (1 - \tau_3^{(i)})(1 - \tau_3^{(j)}) \frac{e^2}{r_{ij}}. \quad (I.9)$$

Ez a kölcsönhatás három részre bontható. Lesz egy izoskalár része, amely nem függ τ_3 -tól, egy izovektor része, amely τ_3 -ban lineáris és egy izotenzor része.

Az izospin keveredést a magokban különféle járulékok hozzák létre. Ha a vizsgált magot úgy tekintjük, hogy egy törzsből (csupa zárt héj) és azon kívül elhelyezkedő nukleonokból áll, akkor megvizsgálhatjuk:

1. magának a törzsnek a járulékát az izospin keveredésben,
2. a törzsön kívüli nukleonok egymás közötti kölcsönhatásából eredő részt,
3. a törzs és a rajta kívül elhelyezkedő nukleonok Coulomb kölcsönhatásából származó járulékot.

Ha egy héjmodellel alapuló becslést végzünk, akkor a törzs járulékára, a könnyű magok tartományában $A \leq 20$ azt kapjuk, hogy az izospin keveredés itt mindenütt 0,5%-on alul van.

A törzsön kívüli nukleonokból származó izospin tisztátalanságot nehezebb megbecsülni, mert a zárt héjak a különböző tömegszám tartományokban is hasonlóan viselkednek, de az egyes nukleonok a különböző héjmodell állapotokban nagyon eltérően. A számításokból kiderült, hogy a törzsön kívüli részecskék olyan gerjesztései, amikor a radiális kvantumszám változik, nagyságrenddel nagyobb izospin

keveredést okozhatnak, mint magának a törzsnek a járuléka az izospin keveredésben.

A 3. pont megvizsgálására tárgyaljuk most egy törzsön kívül elhelyezkedő nukleon gerjesztéseit, és tegyük fel, hogy a törzs az R töltéssugáron belül egyenletesen töltött. Akkor az i -edik részecskére ható Coulomb kölcsönhatás alakja:

$$V_C(i) = \frac{Z}{R} \frac{e^2}{2} (1 - \tau_3^{(i)}) \left[\frac{3}{2} - \frac{1}{2} \frac{r_i^2}{R^2} \right], \quad \text{ha } r_i < R,$$

és

$$V_C(i) = \frac{Z}{R} \frac{e^2}{2} (1 - \tau_3^{(i)}), \quad \text{ha } r_i > R.$$

Az izotenzor részt itt már elhanyagoltuk. Harmonikus oszcillátor hullámfüggvényekkel meg lehet mutatni, hogy az $r_i > R$ részből származó kölcsönhatás, tehát a magon kívüli tartomány járuléka a nukleáris mátrixelemekhez, csak néhány százaléka a mag belsejéből adódónak. Hogy a törzs izospin tisztátalansága vagy a törzs és a rajta kívül levő nukleonok kölcsönhatásából származó keveredés a nagyobb, azt a konkrét esetek határozzák meg [21].

Várható, hogy pl. egy $T=0$ izospinű állapothoz a Coulomb kölcsönhatás izovektor része hozzákever egy $T=1$ komponenst. A perturbáció jellege miatt az állapot j és l értéke nem változik meg, csak a radiális kvantumszám. A megváltozás, zérus vagy egységnyi. A keveredés mértéke a perturbáció számítás szerint az energia nevezővel fordítva arányos. Minél távolabb van egymástól energiában a kérdéses állapot a másik T értéket képviselő állapottól, annál kisebb a keveredés mértéke. Alapállapot esetén ez egészen elhanyagolható lehet. Magasabb gerjesztési energiájú állapot esetén nagyobb valószínűséggel fekszenek a közelben olyan állapotok, amelyek izospin keveredést okozhatnak.

Az izospin keveredés mértéke egy „ a ” gerjesztett állapotban:

$$\sum_i \left[\frac{\langle a | V_C | i \rangle}{E_a - E_i} \right]^2$$

ahol E_a a vizsgált állapot energiája, és E_i gerjesztési energiáknál vannak a másik izospint hordozó „szennyező” állapotok.

Izospin keveredés hatása γ átmenetekre

Az izospin keveredés hatására az E1, illetve M1 átmenetekre vonatkozó kiválasztási szabályok módosulnak. Előfordulhat, hogy az átmeneti mátrixelem sokkal nagyobb a keveredő állapotra, mint az eredetileg vizsgált állapot esetében. Például az E1 átmenetekre igen jelentős változást okozhat az, ha a gerjesztett állapot kevertségét a közelben levő E1 óriás rezonancia okozza. Az ^{16}O magban például a 7.12 MeV gerjesztett állapot $J^\pi=1^-$, $T=0$ bomlása az alapra $J^\pi=0^+$, $T=0$; E1 sugárzással történik és a gerjesztett állapotba $T=1$ komponensek keverednek. Erre az E1 átmenetre a mátrixelem a következő alakba írható a már említett jelölésekkel:

$$M_{ab}(E1) = \sum_i \frac{\langle a | V_C | i \rangle}{E_a - E_i} M_{ib}(E1; T_i=1). \quad (\text{I.11})$$

Más típusú átmenetekre hasonlóan fogalmazható meg a Coulomb kölcsönhatás szerepe. Kivételt képeznek az M1 átmenetek, mivel az M1 átmenet operátora nem függ radiális kvantumszámtól. Az izospin keveredést ilyen esetben főleg az azonos konfigurációk járuléka okozza. A két keveredő konfiguráció csak izospin értékében különbözik. Ha ezek egymástól elég távol vannak, akkor a nagy energia nevező megakadályozza a keveredést. Ez könnyű magoknál, alacsony gerjesztési energiákra teljesül is.

T – T keveredés

Eddig arról volt szó, hogy adott állapot esetén kétféle T érték keveredett, ami bizonyos esetekben együtt járt a különböző radiális kvantumszámok keveredésével is. A töltésfüggő erőnek lehet olyan hatása is, amely az azonos T értékű állapotokat keveri össze, a T_3 értéktől függően. Ha egy zárt $N=Z$ törzsön kívüli egy nukleont vizsgálunk, összehasonlíthatjuk a $T_3 = +\frac{1}{2}$ és $T_3 = -\frac{1}{2}$ magban létrejött átmeneteket. A 3. kiválasztási szabály szerint az E1 átmenetek azonos erősségűek a két magban, ha az állapotok izospinje tiszta. Ezzel szemben viszont a $T_3 = -\frac{1}{2}$ magban egy erős Coulomb tasztítás lép fel, ami nincs a neutron ($T_3 = +\frac{1}{2}$) esetén. Ezért bizonyos állapotok radiális hullámfüggvénye a $T_3 = -\frac{1}{2}$ magban eltorzul, ami ugyanahhoz a végeredményhez vezet, mintha különféle radiális kvantumszámok keveredtek volna. A radiális integrálok tehát T_3 függőek lesznek, és bár a hatás nem nagy, de a 2. és 3. kiválasztási szabályokat sérteni fogja, éppúgy, mintha valódi T keveredésről lenne szó. Lane és Soper [22] kimutatták, hogy ez a fajta keveredés nagy lehet a közepes és nehéz magok esetén.

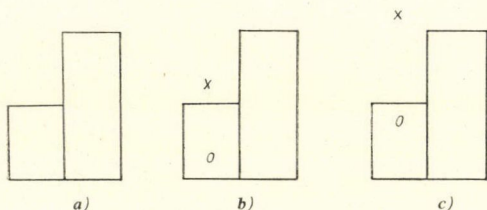
Izospin keveredés a nehéz magokban

Ha a nehéz magok tartományában vizsgáljuk az izospin keveredést, figyelembe kell vennünk egy nagyon fontos változást az előbbiekhöz képest, a tömegszámmal egyre növekvő neutron többletet.

Lane és Soper [22, 23] vizsgálták meg a nehéz magokra az izospin tisztaság kérdését. Megmutatták, hogy ebben a tömegszám tartományban az izospin dinamikusan érvényes, még nagy keveredések esetén is (analóg állapotok). A stabilitási vonal közelébe eső magoknál az alacsonyan fekvő állapotokra pedig, az izospin igen jó kvantumszám. Tehát durván szólva az izospin-tisztaság egyre romlik amint az $A=40$ felé tartunk könnyű magok felől, efölött a neutron többlet növekedésével több, az izospin keveredést gátló tényező lép fel annak ellenére, hogy az egy protonra jutó Coulomb energia is növekszik.

Az 1. ábrán látható proton gerjesztés esetét tárgyaljuk példaképpen. Az 1a ábra mutatja a betöltött proton és neutron héjakat. Az 1b és 1c ábra a proton lyukrézszeceke

gerjesztéseket képviseli. Hogy a háromféle rendszer izospin tisztaságát megvizsgáljuk alkalmazzuk rá az izospin növelő operátort, ami tiszta izospinű állapotra alkalmazva zérust ad eredményül. (Azaz, az illető állapotban a proton nem cserélhető ki neutronra.) Ebből következik, hogy az 1a és 1b rendszer tiszta izospinű állapotokat képvisel, míg az 1c ábra esetén a $T=M_T$ izospin érték mellett a $T=M_T+1$ érték is megjelenhet. Az 1c rendszer hullámfüggvénye tehát



1. ábra

$$\Psi = \Psi_0 + \sum'_{n,l} \sqrt{N_{nl}} \beta_{nl} \Psi'_{nl}$$

alakú. Itt Ψ_0 képviseli az izospinben tiszta konfigurációkat, amelyek a $T=M_T$ értékű állapotokat tartalmazzák, és Ψ'_{nl} azokat a tagokat, amelyek az 1c-hez hasonlóan az izospinben keverték. N_{nl} az (n, l) állapotban levő

protonok száma, összegezés azokra a proton állapotokra vonatkozik, amelyekre az $(n+1, l)$ állapot a neutron Fermi nivó felett helyezkedik el. β_{nl} sorfejtési együttható. Ebből rögtön látható, hogy a neutron többlet nagyon csökkenti az izospin keveredést tartalmazó összeget. Az izospin keveredés mértékének csökkentésében tehát az egyik fontos tényező ez az ún. Pauli „csillapítás”. Itt a Pauli elv gátolja meg az izospin keveredést azáltal, hogy a proton állapotok legtöbbször megfelelő neutron állapot már be van töltve.

A hullámfüggvényt

$$\Psi = \Phi_T + \gamma \Phi_{T+1}$$

alakba írva, annak kétféle kifejezéséből $|\gamma|^2$ az izospin keveredés teljes erőssége kapható meg.

$$|\gamma|^2 = \frac{1}{N-Z+2} \sum' N_{nl} |\beta_{nl}|^2.$$

Ebből pedig látszik a második fontos tényező, amely a nehéz magok izospin tisztaságát őrzi, a geometriai csillapítás. Minél nagyobb az $N-Z$ különbség, annál kisebb a $|\gamma|^2$. Ez az izospintérbeli Clebsch—Gordan együtthatókból származik.

Az optikai modellbe bevezetett

$$4 \frac{V_1}{A} (\vec{i} \cdot \vec{T})$$

izospin potenciál okozza a „csillapítások” harmadik fajtáját. Ha ezt mint maradék kölcsönhatást vesszük figyelembe a nukleonok és egy szokásos potenciál gödör között, akkor ez felhasítja az 1c ábra típusú állapotokat egy T és egy $T+1$ izospinű komponensre. Ekkor ugyanis az eddigi egyszerű lyuk-részecske proton gerjesztés már nem saját állapota a Hamilton operátornak. A $|\gamma|^2$ kifejezésében a $|\beta_{nl}|$ helyén egy radiális mátrix elem szerepel egy energianevezővel [24]. Bohr, Damgård és Motelson kimutatták [25], hogy az izospin potenciál megváltoztatja ezt az energia nevezőt, megnöveli a kétféle izospinű állapot távolságát $2(N-Z+2) \frac{V_1}{A}$ -vel. Az izo-

spin keveredés mértékének ezt a gátló tényezőjét nevezzük analóg csillapításnak.

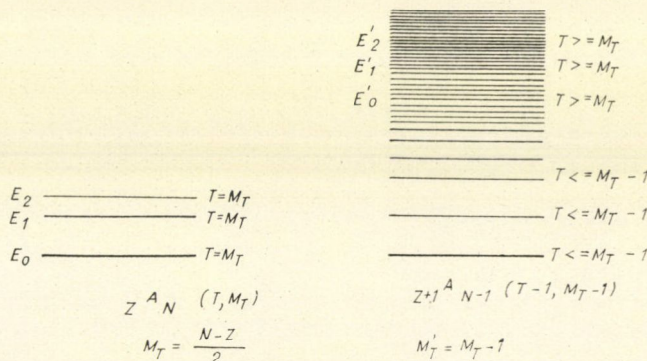
Az alábbi táblázatból látható mindezek rövid összefoglalása. Az izospin keveredés mértéke a könnyű magok alacsonyán fekvő állapotaira kicsiny, annak ellenére, hogy itt még csillapítási faktorok nem működnek. Az izospin keveredés legnagyobb az $A=40$ esetén, és azután a neutron többlet növekedésével újból csökken, amint a csillapítási tényezők hatni tudnak.

I. TÁBLÁZAT

Mag	Csillapítási faktorok			$ \gamma ^2$ %-ban
	Pauli	Geometriai	Analóg	
^{16}O	1,00	2	1,40	0,11
^{40}Ca	1,05	2	1,21	1,81
^{48}Ca	1,05	10	2,34	0,15
^{90}Zr	1,12	12	1,83	1,20
^{208}Pb	1,58	46	3,15	0,85

Szülő és analóg állapotok közepes és nehéz magokban

A bevezetésben már utaltunk rá, hogy egy izobár multipletten belül az állapotok egymásnak analóg állapotai. Az egyszerűbb hivatkozás kedvéért az egy töltés-multipletten belül a (T, M_T) és $(T, M_T - 1)$ kvantumszámokkal jellemzett állapotokat egymás szülő, ill. analóg állapotának nevezzük. A 2. ábra sematikusan tükrözi azt, hogy milyen kapcsolatban vannak egymással egy közepes vagy nehezebb magban a szülő és analóg állapotok.



2. ábra. Szülő és analóg állapotok

Az ${}_Z A_N$ magban láthatjuk a szülő állapotokat (E_0, E_1, E_2) energiáknál T izospin értékkel és M_T izospin harmadik komponenssel. Ha ebben a magban egy neutron protonra cserélünk ki, akkor kapjuk az ugyancsak A tömegszámú ${}_{Z+1} A_{N-1}$ magot, amelyben az alap és a normál gerjesztett állapotok izospinje, az izospin harmadik komponense itteni értékének megfelelően $T-1$ azaz M_T-1 . Megjelennek azonban

a ΔE_C Coulomb energiakülönbség és a neutron—proton tömegkülönbségnek megfelelő energiánál olyan állapotok, amelyekre az izospin érték $T=M_T$ a szülő állapotoknak megfelelően, de ugyancsak M_T-1 harmadik komponenssel. További fel-tűnő tulajdonságuk, hogy az E_0-E_1 vagy az E_1-E_2 energiakülönbségek igen jól megfelelnek a szülő magban levő $E'_0-E'_1$, ill. $E'_1-E'_2$ energia különbségeknak, és spin paritás értékük is a szülő állapotnak megfelelő.

Az izospin növelő, illetve csökkentő operátorok alkalmazásával kaphatjuk meg egymásból az említett állapotokat. Az (I. 8) összefüggésben most $T=M_T$ feltételezés-sel írhatjuk, hogy

$$T_-|T, T\rangle = (2T)^{\frac{1}{2}}|T, T-1\rangle,$$

$$T_+|T, T-1\rangle = (2T)^{\frac{1}{2}}|T, T\rangle.$$

A szülő állapotból tehát a T_- operátor alkalmazásával jutunk az analóg állapotba.

Legyen most egy $|C\rangle$ állapotú targetmag T izospin és $M_T=T$ harmadik komponens értékkel, és vizsgáljunk egy szórásproblémát. Erre a $|C\rangle$ törzsre nézve az extra nukleon legyen kötött. A törzs $|A\rangle$ analóg állapota akkor:

$$|A\rangle = (2T)^{-\frac{1}{2}}T_-|C\rangle$$

Az $|nC\rangle$ és $|pC\rangle$ állapotok, amelyek a törzs plusz egy neutron, ill. törzs plusz egy protont jelentenek, kifejezhetők a teljes izospin $T_t = T \pm 1/2$ állapotai szerint:

$$|pC\rangle = (2T+1)^{-\frac{1}{2}}[|T_>\rangle + (2T)^{\frac{1}{2}}|T_<\rangle],$$

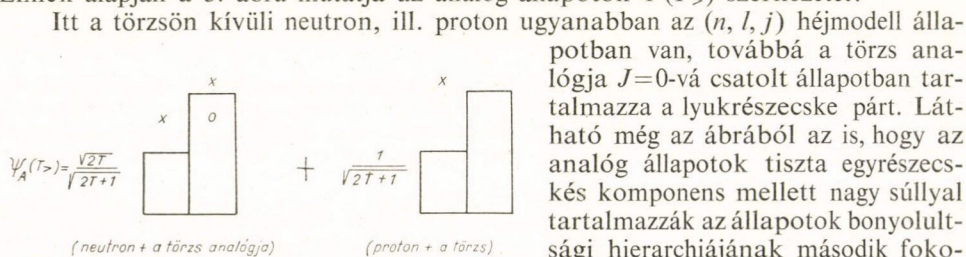
$$|nC\rangle = (2T+1)^{-\frac{1}{2}}[(2T)^{\frac{1}{2}}|T_>\rangle - |T_<\rangle],$$

ahol $T_> = T + \frac{1}{2}$ és $T_< = T - \frac{1}{2}$ és $M_T = T - \frac{1}{2}$. Ezen egyenletek alapján könnyen felírhatjuk a $T_>$, ill. $T_<$ izospinű állapotokat:

$$|T_>\rangle = (2T+1)^{-\frac{1}{2}}[(2T)^{\frac{1}{2}}|nA\rangle + |pC\rangle], \quad (\text{I.12a})$$

$$|T_<\rangle = (2T+1)^{-\frac{1}{2}}[(2T)^{\frac{1}{2}}|pC\rangle - |nA\rangle]. \quad (\text{I.12b})$$

Ennek alapján a 3. ábra mutatja az analóg állapotok $\Psi(T_>)$ szerkezetét:



3. ábra. Analóg állapot hullámfüggvénye

minél nagyobb a $T_>$ érték, azaz minél nagyobb a többlet neutronok száma. Ezen a komponensen keresztül tud az izobár analóg állapot a környezetben levő bonyolult közbenső állapotokkal keveredni. Az analóg állapotoknak ez az ún. „doorway” szerkezete igen érdekes olyan szempontból, hogy ezt a kétrészesce, egy lyuk jellegű kon-

figurációt eddig még csak itt lehetett kimutatni biztonsággal. Az ilyen szerkezet létezése felelős pl. a proton szórásban talált közbenső rezonanciák fellépéséért az analóg állapotoknak megfelelő energiáknál. Az egyrészecske rezonanciák szélessége mint tudjuk MeV nagyságrendű, míg a bonyolult szerkezetű közbenső-mag állapotok igen keskeny eV nagyságrendű rezonancia szélességgel rendelkeznek. Ezek közé esik az IAR-ek szélessége, amely a keV-es tartományba sorolható be. Feshbach szerint az ilyen közbenső rezonanciákat éppen a kétrészecske, egy lyuk szerkezetű „doorway” állapotok okozzák.

Antianalóg állapotok

Már láttuk, hogy az izospin függő potenciál az állapotokat az izospin értéknek megfelelően felhasítja. Legyen ismét a teljes Hamilton operátor olyan, hogy izospin potenciált tartalmaz, és szorítkozzunk az állapotoknak arra az alterére, amely a kétrészecske, egy lyuk konfigurációkat foglalja magába. Ezek közül is válasszuk ki az olyan típusúakat, ahol a lyuk-részecske pár zérus impulzusmomentumot képezve csatolódott össze. Ha most a H operátort ebben az alterben diagonalizáljuk, akkor eredményül azt kapjuk, hogy lesz egy állapot Φ_0 , $T_>$ izospinnel, amely energiában a nem perturbált szinthez képest magasra eltolódik, és a maradék többi állapot súlypontja alig változik. Ez a Φ_0 állapot az izobár analóg állapot, ill. annak „doorway” komponense. A maradék állapotok fő jellemzője, hogy konfigurációjuk az analóg állapotéval azonos, de az izospin értékük $T_< = T_> - 1$ [25]. Ha az analóg állapotot az (I. 12a) írja le, akkor a hozzátartozó antianalóg konfiguráció az (I. 12b) alakú kifejezés.

A lyuk-részecske pár csatolódhat, azonban nemzérus impulzusmomentumú is. Ilyenkor a törzs „polarizációjáról” beszélünk [26]. Ha ilyen állapotok léteznek az antianalóg állapot környezetében, akkor a tiszta antianalóg konfiguráció keveredhet ezekkel az állapotokkal, és erőssége felbomlik több nívóra. A nívók energiáit az erősségekkel (reakcióban mért spektroszkópiai faktoraikkal) súlyozva, megkaphatjuk a fel nem hasadt antianalóg állapot helyét.

Az analóg és antianalóg állapotok közötti energiakülönbség, azaz az izospin felhasadás mértéke, az optikai modell szimmetria potenciáljával kifejezve:

$$E_{T_>} - E_{T_<} = \frac{T_> \cdot V_1}{A}. \quad (\text{I.13})$$

V_1 értéke az optikai modell számítások és a mérések alapján 80 és 160 MeV között lehet. Az energiakülönbség megerősítheti az egyes esetekben, hogy valóban az antianalóg állapottal állunk szemben, vagy másféle gerjesztésről van szó.

Az antianalóg állapotokat az $s-d$ héjban, γ -átmenetekben találták meg. Erős M1 átmenetet észleltek az analóg állapotból, amely az antianalóg állapotra vezetett [27]. (Részletesen majd az analóg állapotok γ -bomlásának tanulmányozásánál tárgyaljuk ezt a jelenséget is.)

Magreakcióban is észleltek antianalóg állapotokat.* ($^3\text{He}, d$) reakcióban ta-

* Ha a transzfer reakcióban az analóg és antianalóg állapotok egyszerre gerjednek, az analóg állapotban jelenlévő kontinuum járulékot megbecsülhetjük [69].

láltak antianalóg állapotokat, pl. a ^{90}Zr [28] és az ^{59}Cu magban is [29]. A példák sorolását folytatni lehet. A zirkon tömegszám tartományában és azon túl már óvatossá kell lennünk az antianalóg állapot definíciójával, mert a neutron többlet a konfigurációkat igen bonyolulttá teheti.

D. Analóg állapotok γ bomlása

Az izobár analóg állapotok γ bomlásának vizsgálata igen hasznos és értékes a mag szerkezeti kutatások szempontjából.

A könnyű magok tartományában még a magasabb gerjesztési energiáknál fekvő nívók is viszonylag egyszerű konfigurációval rendelkeznek, amely a héjmodell keretein belül könnyen értelmezhető. A közepes és nehéz magok esetében a helyzet sokkal komplikáltabb. Az itt megvalósuló konfigurációk igen sokfélék lehetnek, és az egyrészecske gerjesztések mellett bonyolult kollektív gerjesztések és ezek kölcsönhatásai is szerepet kapnak. Így az állapotok spektroszkópiája igen nehézé válik. Nem elég meghatározni egy ismeretlen mag állapot spinjét és paritását ahhoz, hogy természetét pontosan feltárjuk. Transzfer reakciókból meghatározhatjuk ugyan a nívó kialakulásánál befogódott részecske pályamomentumát, és spektroszkópiai faktorát, de ez sem mindig elég információ.

Nagyon lényeges kiegészítő felvilágosítás lehet azonban egy ilyen bonyolult szerkezetű magban a γ átmenetek vizsgálata. Az elektromágneses átmenetek operátora egyrészecske operátor. Ez azt jelenti, hogy elsőrendben csak olyan állapotok között létesít átmenetet, amelyek között egy részecske koordinátaiban történt változás. Azokra az átmenetekre, amelyek sok nukleon átrendeződésével járnak, az átmeneti valószínűség igen kicsi lesz. Ebből már látszik, hogy miért játszanak az izobár állapotok olyan fontos szerepet a nehezebb magok γ spektroszkópiájában.

Ha egy alap vagy alacsonyban fekvő gerjesztett állapot szerkezete pl. (d, p) reakcióból vagy más módon ismert, akkor annak az állapotnak az izobár analóg állapotáról már sokat tudunk. A szülő állapotból csupán a T_- operátor alkalmazásával kapjuk az analóg állapotot. Így az állapot jellege, spin, paritás értéke és szerkezete változatlan marad. Spektroszkópiai faktorát például a szülő állapothoz viszonyítva az alábbi összefüggés írja le.

$$S_p = \frac{1}{2T+1} S_n, \quad (\text{I.14})$$

ahol S_n a (d, p) reakcióban a szülő állaputra megállapított spektroszkópiai faktor, míg S_p az izobár analóg rezonancia spektroszkópiai faktora, amit az elasztikus proton szórás analiziséből kapunk. Az $\frac{1}{2T+1}$ faktor jelenléte az (I. 12) összefüggés alapján világos.

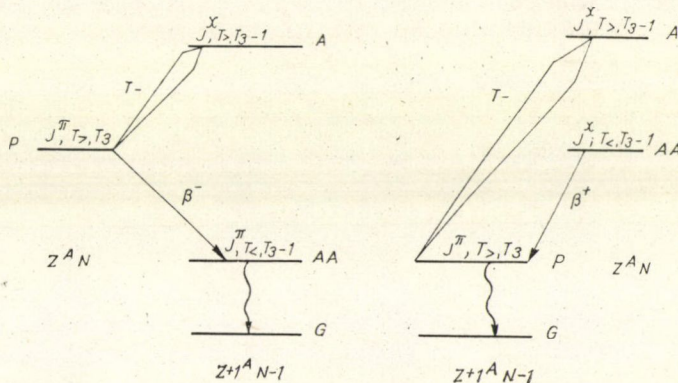
Ha az izobár analóg állapotokat megtaláljuk az adott mag komplikált szerkezetű ismeretlen állapotai között, akkor ezek γ bomlásait vizsgálva kiválasztjuk a viszonylag egyszerű szerkezetű végállapotokat. Azt várhatjuk, hogy az izobár analóg állapot elektromágneses átmenettel csak az alapállapotba vagy hozzá hasonló egyszerű szerkezetű végállapotba fog elbomlani. Ebből pedig fontos következtetéseket vonhatunk le a végállapotok szerkezetére vonatkozóan.

Érdekes a γ bomlásból nyert információkat a magreakciókból nyert adatokkal is kiegészíteni. Így a kettő együtt már bizonyos esetekben pontos képet tud adni a vizsgált állapot szerkezetéről.

Nehezebb magoknál, ha egy magban több izobár analóg állapotot találunk, azok γ átmeneteinek egymás közötti összehasonlítása is fontos lehet az eligazításban.

β és γ átmenetek kapcsolata

Érdekes kiegészítő forrás még a β átmenetek tanulmányozása és azok összehasonlítása a megfelelő γ átmenetekkel. Nyilvánvaló ugyanis, hogy a β bomlások is szoros kapcsolatban vannak az izospinnel, mivel ilyen esetekben is neutronnak protonná (β^- -bomlás) vagy protonnak neutronná változásáról van szó (β^+ bomlás vagy elektron befogás). Tudjuk, hogy a Fermi típusú β bomlásra érvényes kiválasztási szabályok: $\Delta J=0$, paritás változás nincs, míg a Gamow—Teller típusú átmenetekre $\Delta J=0, \pm 1$ ($0 \rightarrow 0$ tiltott!) és paritás változás nincs. A szuper megengedett β átmenetek éppen egy izospin multipllett tagjai között mennek végbe $\Delta T=0, \Delta T_3 = \pm 1$. Lehetséges azonban, hogy $\Delta T \neq 0$, vagyis az átmenetek nem azonos multipllettben mennek végbe, hanem két különböző T értékű multipllett állapotai között. Ilyenkor ha izospin változás van, akkor a megengedett átmenetre várható f_t értéknél nagyobb várunk, vagyis az átmeneti valószínűség lecsökkenését. $\Delta T \neq 0$ átmenet létrejöhet úgyis, hogy $\Delta J=0$, ami lehet pl. a szülő és antianalóg állapotot összekötő β átmenet. Ennek az átmenetnek a vizsgálata nem sok magnál lehetséges, de $\beta-\gamma$ cirkuláris polarizáció méréssel izospin keveredést lehet meghatározni, ill. a Coulomb mátrix elemet ($\langle H_C \rangle = \langle T, T-1 | H_C | T-1, T-1 \rangle$ [30, 31]). T.i. a Fermi átmenet mátrix eleme



4. ábra. Szülő és antianalóg állapotok β bomlása

$M_V = \langle f | T_- | i \rangle$. Így ha az izospin jó kvantumszám, akkor a Fermi átmenet zérus lesz $\Delta T \neq 0$ esetben. Az analóg és antianalóg állapot azonban keveredhet, és ez azt eredményezi, hogy az átmenet mégis megfigyelhető. Ilyen esetet illusztrál a 4. ábra, β^- és β^+ bomlásokra.

Párhuzamot vonhatunk bizonyos típusú γ átmenetek és β átmenetek között átmeneti valószínűségeik összehasonlítása alapján.

Ha tehát meghatároztuk a γ átmenet erősségét, abból a β átmenet erősségére következtethetünk, vagy fordítva [32].

A megengedett Gamow—Teller típusú β átmenetek az $L=1$ multipolaritású elektromágneses átmenetekkel állnak szoros kapcsolatban. Az $M1$ átmenetek erőssége $A(M1)$ és a Gamow—Teller átmenetek erőssége $A(GT)$ között az alábbi összefüggés érvényes [32]:

$$\begin{aligned} A(M1) &= \frac{1}{2} \frac{(CG)_{\gamma}^2}{(CG)_{\beta}^2} (\mu_p - \mu_n) \left[1 + \frac{1}{(\mu_p - \mu_n)} \frac{\langle f | I\tau | i \rangle^2}{\langle f | s\tau | i \rangle} \right]^2 A(GT) = \\ &= 11,1 \frac{(CG)_{\gamma}^2}{(CG)_{\beta}^2} \left[1 + 0,11 \frac{\langle f | I\tau | i \rangle^2}{\langle f | s\tau | i \rangle} \right]^2 A(GT), \end{aligned} \quad (I.15)$$

ahol

$$(CG)_{\gamma} = (T_f T_{f3}^{10} | T_i T_{i3}^{\gamma}),$$

$$(CG)_{\beta} = (T_f T_{f3}^{\beta} | T_i T_{i3}^{\beta})$$

izospin csatolási együtthatók.

Ha az l kvantumszám helyett a j értéket használjuk, $A(M1)$ -re az (I.15)-höz hasonló kifejezést nyerünk.

$$A(M1) = 8,85 \frac{(CG)_{\gamma}^2}{(CG)_{\beta}^2} \left[1 + 0,12 \frac{\langle f | j\tau | i \rangle^2}{\langle f | s\tau | i \rangle} \right]^2 A(GT). \quad (I.16)$$

Ebben a kifejezésben a j -t tartalmazó mátrixelem eltűnik ha $j \rightarrow j \pm 1$ egyréscske átmenet történik. Jelentősége akkor van, ha $j \rightarrow j$ átmenet megy végbe. Ilyen a már említett analóg-antianalóg $M1$ átmenetek esete.

A $A(M1)$ és $A(GT)$ közötti összefüggésnek az érvényességére igen szép példa a ^{12}C mag γ átmeneteinek és az $A=12$ rendszer β^- és β^+ átmeneteinek összehasonlítása. Az eredményeket a II. táblázat mutatja.

II. TÁBLÁZAT

γ átmenet MeV	$J_i^{\pi}, T_i \rightarrow J_f^{\pi}, T_f$	$A(M1)/(2J_{f+1})$			$A(GT)/(2J_{f+1})$	
		Kísérlet	Elmélet	„ β ”	Kísérlet	Elmélet
15,1 \rightarrow 0	1 ⁺ , 1 \rightarrow 0 ⁺ , 0	3,95 \pm 0,15	3,23	3,91	0,352	0,341
15,1 \rightarrow 4,4	1 ⁺ , 1 \rightarrow 2 ⁺ , 0	0,1	0,08	0,08	0,007	0,014

A táblázat „ β ” oszlopa, a β bomlásból mért $A(GT)$ faktorból az (I.15) alapján számított $A(M1)$ érték.

M1 átmenetek

Nagyon nehéz feladat lenne a különböző magtartományokban talált analóg állapotok γ bomlásainak teljes áttekintése és rendszerezése, ez a jelen dolgozat kezei alá nem tartozik.

Az analóg állapotok esetében legáltalánosabban és legtöbbet vizsgált átmenetek az $M1$ és $E1$ sugárzások. Az $M1$ átmenetek között pedig különösen fontosak és érdekesek az analóg \rightarrow antianalóg $M1$ átmenetek. Ezek képezték vizsgálataink fő tárgyát is.

Az izospin felhasadás jelensége, az analóg állapottal szoros rokonságban levő antianalóg állapot létezése, már a p héjba tartozó magok esetében is megtalálható. A figyelem azonban csak az izospin függő potenciál bevezetése után terelődött erre a jelenségre. A ^8Be vagy ^{12}C magok γ átmenetei között is kiugróan nagy intenzitásúak a $(J^\pi, T) = (1^+, 1) \rightarrow (1^+, 0)$ vagy $(2^+, 1) \rightarrow (2^+, 0)$, ill. $(3^-, 1) \rightarrow (3^-, 0)$ átmenetek. Még erősebbek a $(J^\pi, 1) \rightarrow (J^\pi, 0)$ típusú átmenetek az ^{14}N mag γ spektrumában.

Az $s-d$ héjban talált analóg-antianalóg átmenetek szintén erősségükkel (amely a Weisskopf egység nagyságrendjébe esik) hívták fel a figyelmet magukra [33]. A ^{31}P , ^{35}Cl , ^{37}Cl magok állnak a lista elején. Az $f_{7/2}$ nukleon + törzs konfigurációval rendelkező analóg állapotok esetében nemcsak az átmenetek erőssége, de az elágazási arány is feltűnő. A teljes átmeneti erősségnek 80–90%-a vezet az analóg állapotból az antianalóg konfigurációra. A III. táblázat foglalja össze a mérési eredményeket ezeknél a magoknál.

III. TÁBLÁZAT

Mag	$^{31}_{15}\text{P}_{16}$	$^{35}_{17}\text{Cl}_{18}$	$^{37}_{17}\text{Cl}_{20}$
Kezdeti és Végállapot MeV	9,40 → 4,43	7,55 → 3,16	10,24 → 3,11
Elágazási arány %	88	97	≥ 80
Mért M1 erősség Weisskopf egységben	$0,5 \pm 0,1$	$1,4 \pm 0,2$	$1,7 \pm 0,3$

(A táblázat a [27], számú hivatkozásból származik.)

Az analóg-antianalóg M1 átmeneteket a héjmodell segítségével próbálják értelmezni, és ez bizonyos egyszerű esetekben sikeres is. A nehézségek akkor jelentkeznek, ha a kérdéses állapotok konfigurációi nem egyszerűek, hanem konfiguráció keveredések is történnek.

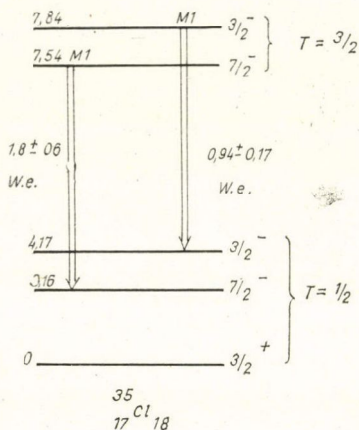
Ha $\Delta T = 1$, az M1 átmenetben csak az izovektor operátor mátrixeleme ad járulékot, az izoskalár rész zérus lesz, az izospin csatolási együtthatók miatt. Ha most egy nukleont vizsgálunk egy olyan „zárt” törzsön kívül, amikor a törzs impulzusmomentuma $J_0 = 0$, és izospinjé T_0 , akkor az M1 átmenetet ennek a nukleonnak az állapotváltozásai hozzák létre. Az M1 átmeneti valószínűség értéke akkor [27]:

$$B(M1) = \frac{9}{8\pi} (2T_i + 1)(T_i M_T | T_f M_T)^2 J(J+1) \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 1 \\ T_f & T_i & T_0 \end{pmatrix} (g_p - g_n)^2. \quad (\text{I.17})$$

Az izospin csatolási együtthatókból adódik, hogy az M1 átmenet valószínűsége annál nagyobb minél kisebb a törzs izospinjé. A g faktorok számértékei az egyes nukleon pályákra viszont olyanok, hogy nagyságrendi eltérés van a $J = l + \frac{1}{2}$ és $J = l - \frac{1}{2}$ pályákra vonatkozó $(g_p - g_n)^2$ értékek között, mégpedig az előbbi javára. Ennek alapján nem várhatjuk, hogy M1 átmenetet találjunk olyan izospin pár között, ahol a $J = j = l - \frac{1}{2}$ értékű állapotok spinje. (Erős lesz például a $p_{3/2} \rightarrow p_{3/2}$ átmenet, de nem találjuk a $p_{1/2} \rightarrow p_{1/2}$ átmenetet.)

Az (I. 17) összefüggésből még az is látszik, hogy minél nagyobb az állapot J értéke, annál erősebb lehet a $T_+ \rightarrow T_-$ M1 átmenet.

Meg kell még jegyeznünk, hogy a héjmodell átmenetek a $T_>$ állapotokból olyan $T_<$ állapotokra ahol $J_0 \neq 0$, különbözni fognak ettől az egyszerű, egy nukleon átmenetet leíró kifejezéstől. Akkor ugyanis az átmeneti valószínűségben a tözs átrendeződésének megfelelő járulék is fellép. Ennek alapján, ha az $M1$ átmenet mért erőssége eltér az így számolt tiszta egyrészeske átmenetre kapott értéktől, akkor a



5. ábra. A ^{35}Cl magban talált analóg-antianalóg átmenetek

magyarázatot abban kereshetjük, hogy a $T_<$ antianalóg állapotba a törzs polarizációjából származó ($J_0 \neq 0$) $T_<$ állapotok keveredtek. Ilyen alapon lehetett értelmezni a ^{31}P -ben talált $(7/2^-, 3/2^-) \rightarrow (7/2^-, 1/2^-)$ analóg-antianalóg átmenetet.

A ^{35}Cl esetében a mért erősség az egyrészeske átmenetnek felelt meg. Az 5. ábrán láthatók a ^{35}Cl -ben talált analóg-antianalóg $M1$ átmenetek és a szóban forgó állapotok.

Az ábrán feltüntettük a ^{35}Cl magban talált $2p_{3/2}$ egyrészeske állapotnak megfelelő analóg állapotot is az $1f_{7/2}$ mellett. Az erős $M1$ átmenet ott is megjelenik.

A ^{39}K magban talált $(3/2^-, 3/2^-) \rightarrow (3/2^-, 1/2^-)$ analóg-antianalóg átmenet, amely $p_{3/2}$ egyrészeske átmenetnek felelt meg az eddigi példákkal szemben, igen gyenge. Erőssége mindössze 0,14 és 0,08 Weisskopf egység. Az antianalóg állapotot itt két állapotra hasadva találták meg [35] $E_x = 3,04$ és $4,08$ MeV gerjesztési energiáknál.

Az átmenetek gyengeségét a polarizált törzs konfigurációinak keveredése nem magyarázza.

A kísérleti adatgyűjtések során úgy tűnt, hogy az $s-d$ héjon túl pl. az $f_{7/2}$ héjba tartozó magoknál az erős $M1$ átmenet már nem jelentkezik. A ^{49}Sc , ^{49}V , ^{51}V magok ezt bizonyítják [36]. A kérdés tisztázására intenzív kísérleti és elméleti [37] vizsgálatok indultak. Ebből a célból tanulmányoztuk a $^{44}\text{Ca}(p, \gamma)$ ^{45}Sc , $^{48}\text{Ti}(p, \gamma)$ ^{49}V és $^{58}\text{Ni}(p, \gamma)$ ^{49}Cu magreakciókat.

E1 átmenetek

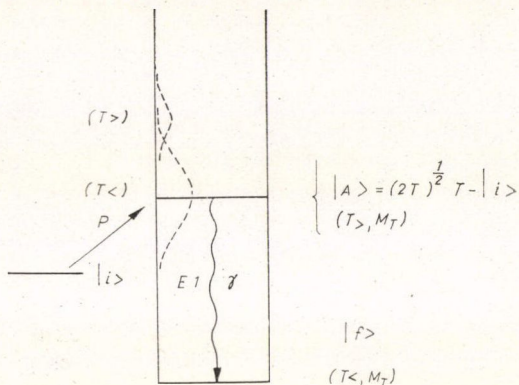
Az $M1$ átmeneteknél nem kevésbé érdekesek és fontosak az analóg állapotok $E1$ átmenetei. Ennek ellenére az $E1$ sugárzások tárgyalásának részletezését most elkerüljük, mert vizsgálataink inkább az előbbi területre korlátozódtak.

Az analóg állapotok több mag esetében olyan gerjesztési energiáknál találhatók, amelyek az $E1$ óriás rezonancia tartományába esnek. A könnyű magok tartományában az óriás rezonancia főleg a $T_> = M_T + 1$ komponenst tartalmazza. A nehéz magok esetében viszont a nagy neutron többletek tartományában a $T_< = M_T$ komponens dominál. Az $A \sim 90$ tömegszám tartományra viszont azt várhatjuk, hogy az óriás rezonancia felhasad, mindkét izospin komponens megtalálható lesz [39]. Vizsgáljuk most az $A \geq 90$ magok γ bomlását.

Legyen egy (p, γ) reakció végállapota $|f\rangle$, a végmag alapállapota. Definíció szerint az összes alapállapotra menő γ sugárzás tartalmazni fogja az alapállapotra

felépült $E1$ óriás rezonancia valamely töredékét. Az óriás dipól rezonancia két komponense a $T_>$ és $T_<$ izospinnek megfelelően bizonyos energiakülönbséggel jelenik meg. A $T_<$ komponens fekszik alacsonyabb energiánál, a $T_>$ feljebb. Az energia különbség pontos kifejezése még ismeretlen. A (p, γ) reakcióban talált izobár analóg rezonancia $T_>$ izospinű állapotnak felel meg és azt várjuk, hogy γ bomlása nem lesz független az óriás dipól rezonancia $T_>$ komponensétől, ha energiában közel esik hozzá. Ilyen (p, γ) reakciók gerjesztési görbéje az analóg rezonanciához közel aszimmetrikus, az interferencia jelenségnek megfelelően. Ezt az interferenciát most kétféle jelenség is okozhatja. Egyik az analóg rezonancia folyamatnak az óriás rezonancia $T_>$ komponensével való interferenciája, a másik az analóg rezonancia és a $T_<$ dipól komponens közötti kölcsönhatás. A 6. ábrán látható a helyzet vázlata [40].

A két interferáló folyamat amplitúdójának meghatározása részletes kísérleti vizsgálatokat igényel. Több analóg állapotnál meghatározták a $\Gamma_{\gamma 0}$ szélesség értéket az alapállapot átmenetre. Valamennyi sokkal kisebb a Weisskopf-féle egyrészecske becsléshez képest. A tiltást kifejező faktor a 7. ábra jelöléseivel



6. ábra. Analóg állapot $E1$ γ bomlása

$$F = \frac{\Gamma_{\text{(egyrészecske)}}}{2M_T \cdot \Gamma_{\gamma}}$$

A tiltás két tényezőből tevődik össze. A $T_>$ dipól rezonancia komponens centroidja sokkal magasabb energiánál fekszik, mint az analóg állapot, ez az egyik ok. A másik pedig abban áll, hogy a $T_>$ komponens teljes erőssége is nagyon lecsökken olyan mértékben, ahogy a többlet neutronok száma nő.

A ^{90}Zr és ^{92}Mo magoknál vizsgáltak ilyen felhasadt dipól rezonanciákat és a velük kapcsolatban álló analóg állapotokat [41, 42].

Az analóg állapot γ átmenetére vonatkozó szélesség elméleti becslésére az alábbi formula szolgálhat, általános esetben is:

$$\Gamma_{\gamma}^{\text{th}} = (2T_0 + 1)^{-1} \Gamma_{\gamma}^{\text{egyr.}} \cdot \beta^2 \cdot S,$$

ahol T_0 a target izospinje, $\Gamma_{\gamma}^{\text{egyr.}}$ a tiszta egyrészecske átmenetre vonatkozó szélesség, β^2 annak a valószínűsége, hogy a végállapotban az illető pálya nincs betöltve, S a szülő állapotról való átváltás spektrális faktora.

Ez a kifejezés számos mérésnél jó egyezésben van a mért átmeneti erősségekkel.

I. Kísérleti eredmények

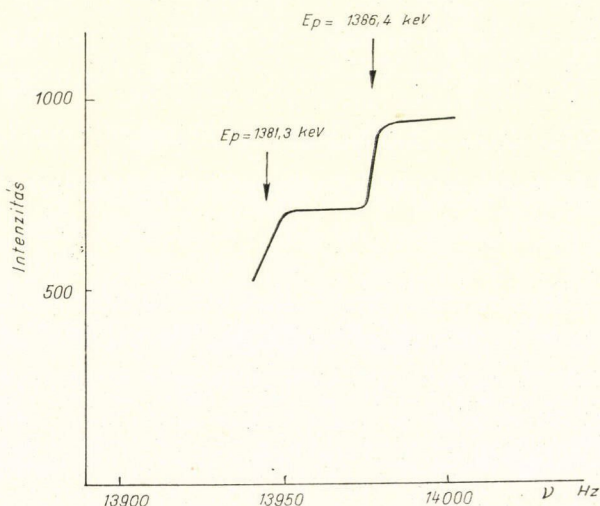
A. Mérési berendezés

Gyorsító

A KFKI 4 MeV-es Van de Graaff generátora szolgáltatja a (p, γ) reakciók tanulmányozásához szükséges proton nyalábot. A rendelkezésre álló gyorsító energia több érdekes izobár analóg rezonancia vizsgálatát tette lehetővé.

A gyorsított proton nyaláb egy analizáló mágnesen halad át, amely kettős célt szolgál. Egyrészt a mágneses tér erősségéből határozzuk meg a nyaláb energiáját, másrészt a mágnes után elhelyezett rés vezérli a gyorsítót stabilizáló koronatriódát. A mágneses tér erősségét proton, ill. ${}^7\text{Li}$ mag mágneses rezonancia frekvenciájának mérésével határozzuk meg. A frekvenciamérő 100 Hz—30 MHz frekvenciatartományban dolgozik, és a frekvencia érték 100 Hz-es lépésekben változtatható. A frekvencia stabilitás $5 \cdot 10^{-7}$, ill. annál jobb. (Ez kb. 20 napra vonatkozik.) Az analizáló mágneses tér stabilitása $5 \cdot 10^{-5}$. Ha csak a mágneses tér ingadozásait vesszük figyelembe, a gyorsító energiastabilitása 2 MeV-en $2 \cdot 10^{-4}$. Ha az ionforrásból kilépő részecskék energiaszórása nagy, akkor ez az érték megnő, de átlagban az energiaszórás 1 keV-en belül marad 2 MeV-es gyorsító energiánál.

Ez a stabilitás biztosította az izobár analóg állapotok vizsgálatának a feltételét, mert az analóg rezonanciák a közepes tömegszámú magoknál már magas gerjesztési energia tartományba esnek, ahol a nívósűrűség igen nagy, és ha az energia-



7. ábra. Az ${}^{27}\text{Al}(p, \gamma){}^{28}\text{Si}$ reakció gerjesztési görbéje

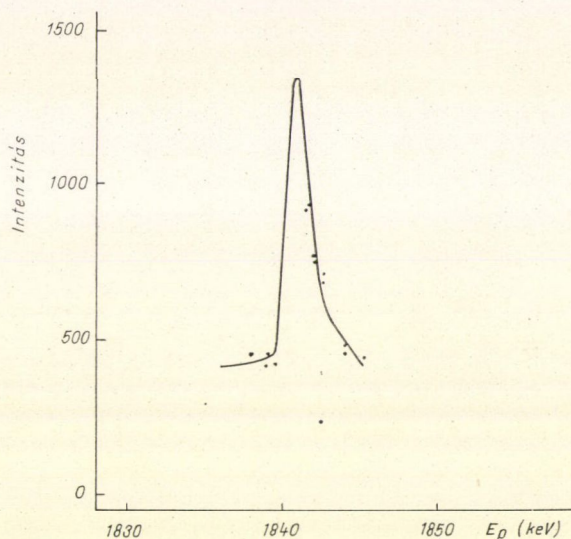
felbontás rossz, akkor a rezonanciák kiátlagolódnak. Az analóg rezonanciák teljes szélessége átlagban 100 eV nagyságrendű, így a gyorsító stabilitása megengedte, hogy megtaláljuk ezeket az állapotokat.

A mágneses eltérítő rendszert ismert energiájú (p, γ) rezonanciákkal kalibráltuk. Kalibráló pontjaink a következők:

1. Az $^{27}\text{Al}(p, \gamma) ^{28}\text{Si}$ reakcióban $E_p = 1381,3 \pm 0,3$ -nél, ill. $1388,45 \pm 0,56$ keV-nél megjelenő rezonanciák [43]. A 7. ábrán láthatjuk a reakció vastag targeten mért gerjesztési görbéjét. A görbén megjelent két lépcső felel meg a két rezonanciának.
2. A $^{58}\text{Ni}(p, \gamma) ^{59}\text{Cu}$ reakcióban $E_p = 1843,45 \pm 0,56$ keV-nél levő rezonancia [44] látható a 8. ábrán.

A hitelesítő rezonanciák megtalálása után az energiákat az

$$E_p = k v^2$$



8. ábra. A $^{58}\text{Ni}(p, \gamma) ^{59}\text{Cu}$ reakció $E_p = 1843,45$ keV rezonanciája

összefüggés alapján számítottuk, miután a k konstans értékét az ismert energiájú rezonanciákból megállapítottuk.

A nyaláb intenzitása a targetnél mérve $0,5\text{--}1 \mu\text{A}$ volt a mérések alatt.

Targetek

A méréseknél használt targetek készítésére és tulajdonságaira vonatkozó adatokat az alábbi táblázatban foglaljuk össze:

IV. TÁBLÁZAT

Target	Dúsítási százalék	Hordozó	Előállítás módja
^{44}Ca	90 %	C	vákuumpárolás
^{48}Ti	természetes izotóp összetétel	Ta	vákuumpárolás
^{58}Ni	97 %	Au	elektrolízis

Targeteink vastagságát úgy választottuk meg, hogy a vizsgált rezonanciák energiájára vonatkoztatva ~ 2 keV legyen. Mivel ez az érték nagyobb a nyaláb energiaszórásánál, az energiafelbontást végeredményben targeteink vastagsága határozta meg.

A gerjesztési görbék felvételénél a vékony targetek voltak alkalmasak. A Γ_γ abszolút értékek meghatározásához viszont vastagabb targeteket használtunk, pl. a $^{48}\text{Ti}(p, \gamma)$ ^{49}V reakciónál 30 keV-es targetet.

Detektorok

Gerjesztési görbék mérésére egy $3'' \times 3''$ NaJ(Tl) szcintillációs számláló szolgált. Ez nagy térszöge és határfoka miatt volt alkalmas a rezonanciák megkeresésére. A gerjesztési görbék mérésénél a számláló felbontása nem játszott szerepet, mert az $E_\gamma > 2,5$ MeV energiájú γ sugárzást integrálisan detektáltuk. A használt $3'' \times 3''$ NaJ(Tl) felbontása 7%.

Az analóg rezonanciák γ bomlási sémájának pontos vizsgálatához 15 cm^3 -es Ge(Li) detektort használtunk. A Ge(Li) detektor felbontása a spektrum nagy energiájú részében (4–8 MeV) kb. 10 keV (9. ábra), míg az alacsony energiájú tartományban (~ 500 keV) ez az érték 3 keV. Ennek a pontos meghatározása a mi spektrumainkból a 3–5 keV-es csatornaszélesség miatt nem lehetséges.

A Ge(Li) detektor határfokának mérése, adott geometriájú elrendezésre a Cr(n, γ) reakcióból származó γ sugárzással történt. Az V. táblázatban találhatók

V. TÁBLÁZAT

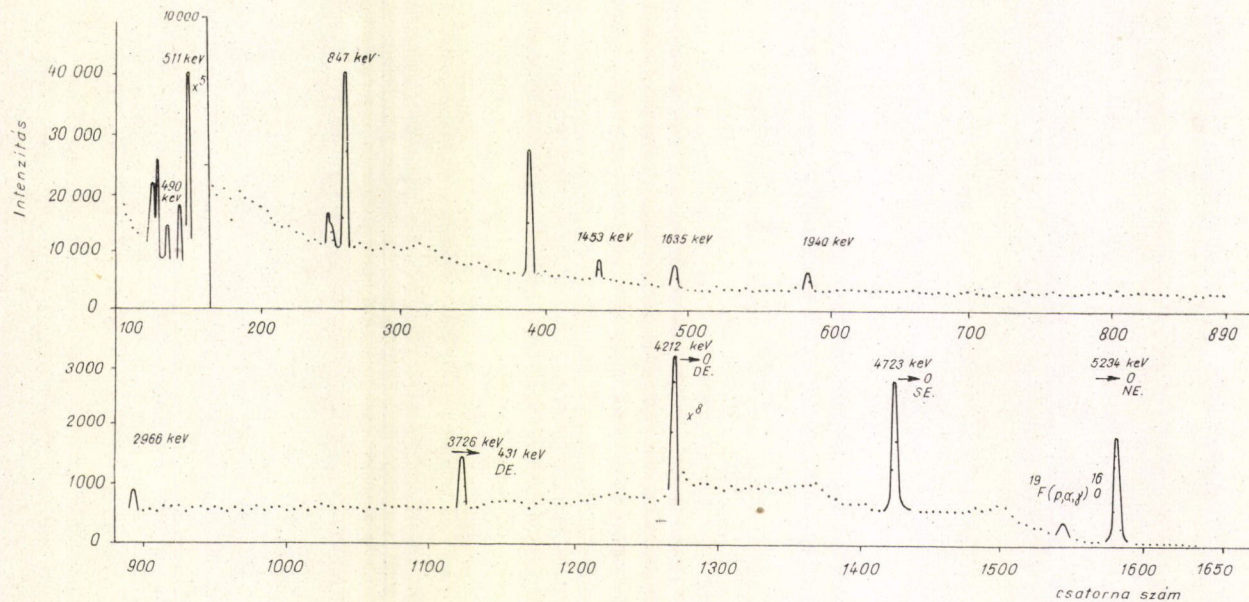
$^{52}\text{Cr}(n, \gamma) ^{53}\text{Cr}$	$^{53}\text{Cr}(n, \gamma) ^{54}\text{Cr}$
7,930 MeV	9,720 MeV
	8,880 MeV
5,610 MeV	7,097 MeV
	6,640 MeV
	6,000 MeV

a kalibrálásra használt γ vonalak és energiáik. A γ sugárzás abszorpciójánál, nagy energiáknál a párkeltés folyamata játszik döntő szerepet. A keletkező elektron–pozitron pár energiája 1,022 MeV-el kisebb, mint a γ sugárzás energiája. A pozitron lefékeződésekor egy elektronnal megsemmisülve két 0,511 MeV energiájú γ kvantumot bocsát ki. A Ge(Li) detektor méréseitől függően mindkét γ kvantum, vagy csak az egyik vagy egyik sem abszorbeálódik a kristályban. Ezért

az amplitúdó eloszlásban adott energiájú γ vonalhoz 3 csúcs tartozik, egymástól 0,511 MeV távolságra. (Alábbiakban a kétszeres kiszökési csúcsot *DE*-vel, az egyszerű *SE*-vel, és a teljes energiának megfelelő csúcsot *NE*-vel jelöljük.)

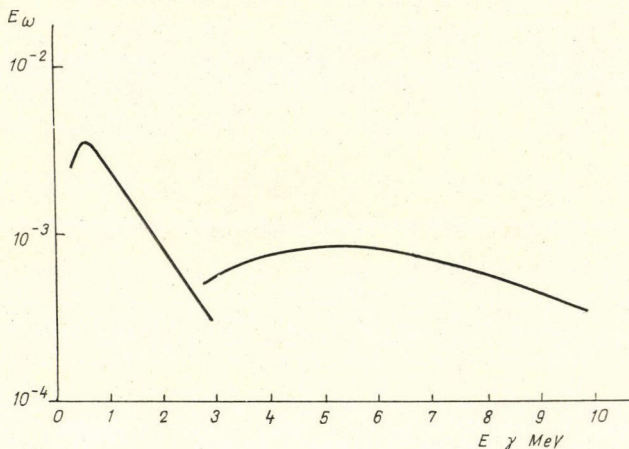
A 9,720 MeV-es γ sugárzás intenzitását ismert határfokú [45] $3'' \times 3''$ NaJ(Tl) detektorral felvett spektrumból határoztuk meg. Ezután teljesen azonos körülmények között történt a γ spektrum mérése a 15 cm^3 -es Ge(Li) detektorral. Ebből kiszámítottuk a kétszeres kiszökésnek megfelelő csúcsok alatti területeket. A vonalak egymás közötti relatív intenzitásai szintén az irodalomban megtalálható értékek [46]. Ennek alapján meg lehetett szerkeszteni a kétszeres kiszökésnek megfelelő csúcsokra az energia-hatásfok kalibrációs görbét, az adott geometria esetén. A 10. ábrán látható az eredmény, kiegészítve az alacsony energiára vonatkozó csúcshatásfok görbével, amelyet etalon preparátumokkal való mérésből nyertünk.

Az ismeretlen energiájú spektrum vonalak energiájának meghatározására három kalibráló pontot használtunk. Alacsony energián az 511 keV megsemmisülési su-



9. ábra. $^{58}\text{Ni}(p, \gamma)^{59}\text{Cu}$ reakció γ spektruma $E_p = 1843$ keV-nél

gázrészecske, közepes energiákra a ThC'' preparátumból származó $E_\gamma = 2,614$ MeV γ sugárzás és a $^{19}\text{F}(p, \alpha\gamma)^{16}\text{O}$ reakcióból jövő $E_\gamma = 6,14$ MeV energiájú γ sugárzás szolgált az energiaskála hitelesítésére.



10. ábra. A 15 cm³-es Ge(Li) detektor energia-hatásfok kalibrációs görbéje

Méréskiértékelés

A Ge(Li) detektorral mért γ spektrumaink kiértékelése gépi úton történt. Az analízátorból lyukszalagon kiadott spektrumokat a számológépnél* mágneses szalagon tároltuk. A kiértékelést végző program, legkisebb négyzetek módszerével Gauss görbét illesztett a csúcsokhoz és ennek alapján adta meg a csúcs helyét, a csúcs alatti területet és a csúcs szélességét hibákkal együtt. (Pócs Lajos által készített MPN1 nevű program.)

B. Izobár analóg rezonanciák az $1f_{7/2}$ és $2p_{3/2}$ héjban

A ^{45}Sc mag

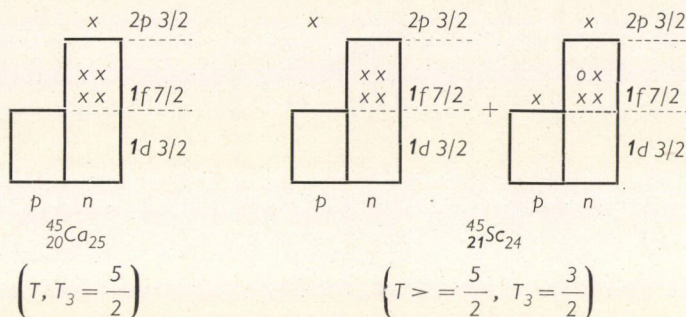
A ^{45}Ca mag ($Z=20$, $N=25$) állapotainak izobár analóg megfelelői a ^{45}Sc magban ($Z=21$, $N=24$) találhatók meg. A ^{45}Ca magot 20 db proton és 25 db neutron alkotja. Az utolsó 5 neutron az $f_{7/2}$ héjmodell pályán helyezkedik el. Az izobár analóg rezonanciákról szerzett eddigi ismereteink alapján azt várjuk, hogy a ^{45}Ca -ban levő egyrészecske jellegű gerjesztett állapotok analógjait találjuk meg nagy valószínűséggel a ^{45}Sc magban. Ilyen jellegű pl. a ^{45}Ca -ban $E_x = 1904$ keV gerjesztési energiánál levő $J^\pi = 3/2^-$ $T = 5/2$ állapot, amely (d, p) stripping reakcióban erősen jelentkezik. A befogott neutron pályamomentuma itt $l_n = 1$, és a mérésből nyert spektroszkópiai faktor S , ill. $(2J+1)S = 2,56$ [47]. Ez a níró tehát a $2p_{3/2}$ egyrészecske állapotban levő neutron állapotnak felel meg. A 11. ábrán láthatjuk a helyzet vázlatát.

* A KFKI, ICT 1905 számoló gépe.

Az analóg állapot helyét, a ^{45}Ca és ^{45}Sc magok közötti Coulomb energiakülönbség kiszámításával kaphatjuk meg [48],

$$\Delta E_c = (1,444 \pm 0,005) \left(\frac{\bar{Z}}{A^{1/3}} \right) - (1,13 \pm 0,04)$$

összefüggés alapján. Ha az izobár analóg rezonanciát pl. (p, γ) reakcióban keressük,



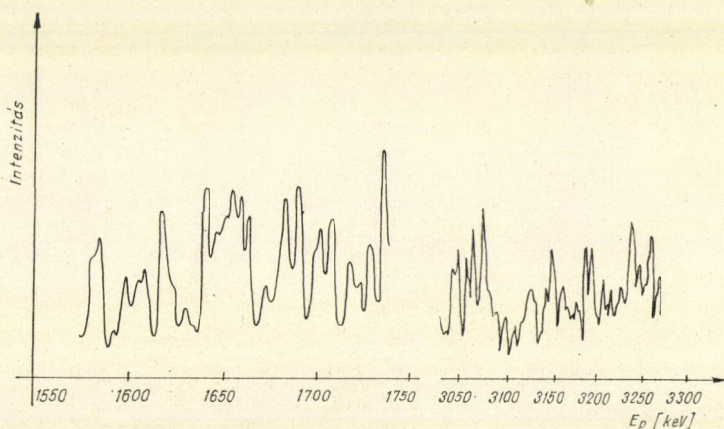
11. ábra. $2p_{3/2}$ szülő, ill. analóg állapot a ^{45}Ca , ill. ^{45}Sc magokban

akkor az alapállapot analóg állapotát az $E_p = \Delta E_c - Q_n$ bombázó proton energiánál találjuk meg, ahol Q_n = az utolsó neutron kötési energiája a szülő magban. Ha gerjesztett állapot analógjáról van szó, akkor az analóg állapot a gerjesztési energiának megfelelően magasabb bombázó energiánál jelenik meg.

Mindezek alapján a ^{45}Ca -ban $E_x = 1904$ keV-nél levő nívó analógját $E_p \sim 1674$ keV bombázó energiánál vártuk.

A $^{44}\text{Ca}(p, \gamma)^{45}\text{Sc}$ reakció gerjesztési görbéje

Ezt a magreakciót már vizsgálták előttünk más szempontból [49], az $E_p = 1300$ keV—2500 keV bombázó energia tartományban. A reakció gerjesztési gör-



12. ábra. $^{44}\text{Ca}(p, \gamma)^{45}\text{Sc}$ reakció gerjesztési görbéje

VI. TÁBLÁZAT

E_p (keV)	Γ_p (keV)	J^π
1628,2	0,036	$3/2^-$
1641,7	0,137	$3/2^-$
1648,0	0,440	$3/2^-$
1660,3	0,085	$3/2^-$
1664,1	0,055	$3/2^-$
1681,6	0,020	$3/2^-$

nem tapasztaltuk. Ennek oka abban kereshető, amint az a későbbi más típusú $[(p, p)$ szórás] kísérletekből [50] kiderült, hogy a keresett izobár analóg állapot 6 nívóra hasadt fel. VI. táblázatunk megadja a nívók helyét és a hozzájuk tartozó Γ_p szélességeket, amelyek a rugalmas protonszórás kísérletből adódtak.

Ennek a kísérletnek az alapján tudtuk csak azonosítani a saját gerjesztési görbénkben jelentkező rezonanciákat, és így találtuk meg a felhasadt analóg rezonanciáknak megfelelő csúcsoakat.

Spektrum mérések

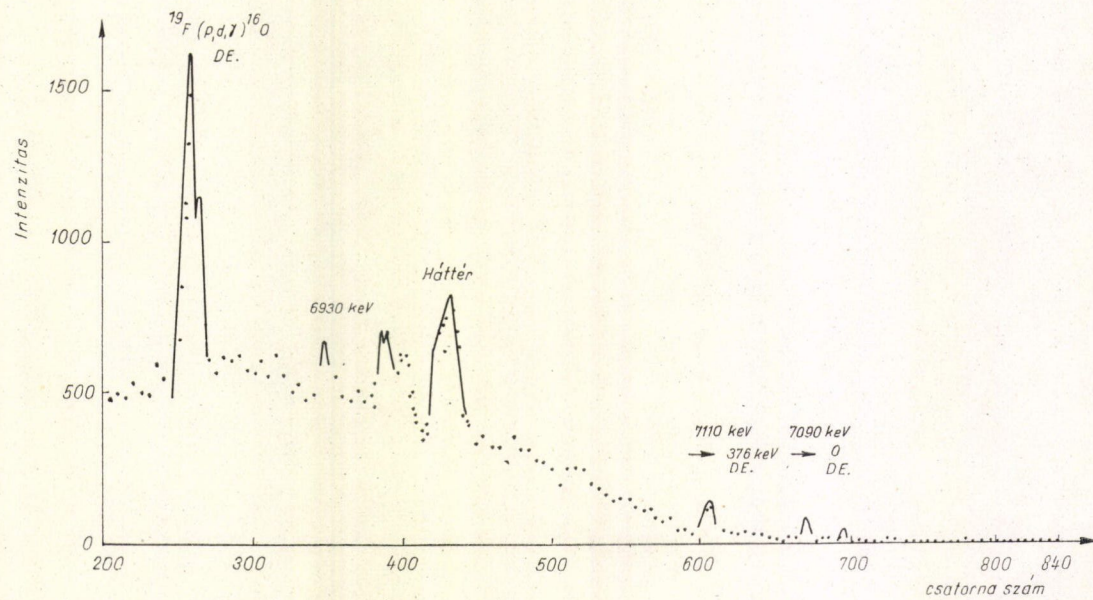
A csúcsok azonosítása után a rezonanciák γ bomlásának tisztázására spektrum méréseket végeztünk. Nemcsak az analóg rezonanciáknak megfelelő csúcsoakon vet-tük fel a spektrumot, de összehasonlítási alapul más rezonanciákon is a kérdéses tartományban. $E_p=1648$ keV-nél mért spektrum található a 13. ábrán. A VII. táblázatban foglaltuk össze a különböző bombázó energiáknál mért spektrumokból származó relatív intenzitásokat az egyes végállapotokra vonatkozóan. A táblázatból látható, hogy az analóg rezonanciáknak megfelelő nívókról viszonylag nagy intenzi-tású γ átmenet figyelhető meg, amely a 376 keV-nél levő végállapotra vezet. Ez az átmenet gyenge, vagy nem található meg más rezonanciák spektrumában. A ^{45}Sc mag nívósémájának alacsony energiájú részét és a $2p_{3/2}$ izobár analóg állapotot a 14. ábrán láthatjuk.

A 376 keV-es gerjesztett állapot spin, paritás értéke $J^\pi=3/2^-$. Ezt Coulomb

VII. TÁBLÁZAT

$^{44}\text{Ca}(p, \gamma)^{45}\text{Sc}$ reakcióból származó γ hozamok (N_γ/N_p), 10^{-12} egységekben

^{45}Sc E_x	E_p (keV) J^π	1583	1619	1640	1650	1658	1757
0	$7/2^-$	5	13	14	21	9	20
12	$3/2^+$	5	39	—	—	18	20
376	$3/2^-$	7	14	36	36	31	22
541	$5/2^+$	12	9	—	—	—	—
719	$5/2^-$	—	—	34	22	3	—
940	$1/2^+$	—	24	—	—	—	—
973	$7/2^+$	—	23	—	—	—	11
1065	—	—	27	—	13	—	—



13. ábra. $^{44}\text{Ca}(p, \gamma)^{45}\text{Sc}$ reakció γ spektruma, $E_p = 1648$ keV-nél

VIII. TÁBLÁZAT

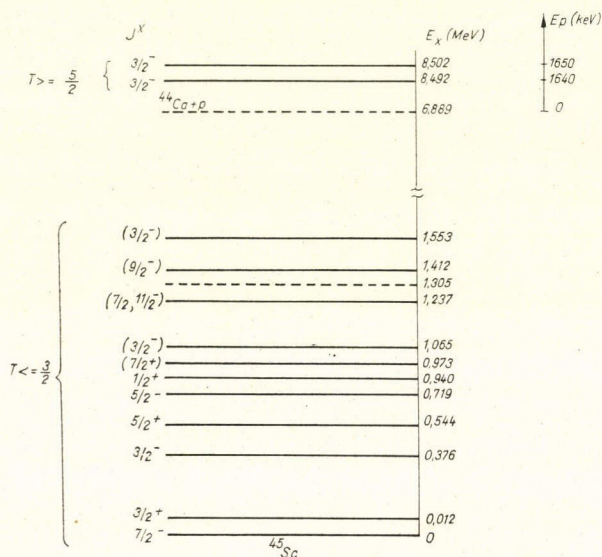
^{45}Sc , E_x (MeV)	*C ² S	l_p	T
0,378	0,14	1	3/2
1,067	0,14	1	3/2
1,553	0,07	1	3/2
2,349	0,03	1	3/2
2,980	0,06	1	3/2
3,022	0,10	1	3/2

* A spektroszkópiai faktor az izospin Clebsch—Gordan együtthatóval (C²) van szorozva.)

hogy a legnagyobb spektroszkópiai faktorral rendelkező nívók közül egyik éppen a 378 keV-nek talált, általunk 376 keV-nek mért állapot. A spektrum alacsony energiájú tartományában nem találtunk feltűnően erős vonalakat, amelyek az analóg állapotból magasabban fekvő gerjesztett állapotokra vezetnének. Az egészen kis energiáknál megjelenő vonalakat, amelyek az első, második, harmadik gerjesztett állapot lebomlásából származnak kivágtuk a spektrumból, hogy ne terhelje feleslegesen az analízátort.

gerjesztési adatokból lehetett megállapítani. A $^{44}\text{Ca}(^3\text{He}, d)^{45}\text{Sc}$ mérés [52] eredményei megerősítik ezt a J^π hozzárendelést, egyben azt bizonyítják, hogy a $2p_{3/2}$ egyrészesecske erősség itt is több nívóra oszlik el, ahogy ezt az alábbi táblázat mutatja.

Ennek alapján a $2p_{3/2}$ egyrészesecske állapot centroidja $E_x = 1.6$ MeV gerjesztési energiánál van. A VIII. táblázatban összefoglalt gerjesztett állapotok pedig a felhasadt antianalóg konfiguráció tagjainak tekinthetők. Láthatjuk,



14. ábra. A ^{45}Sc mag nívósémája

Γ_γ abszolút értékek meghatározása

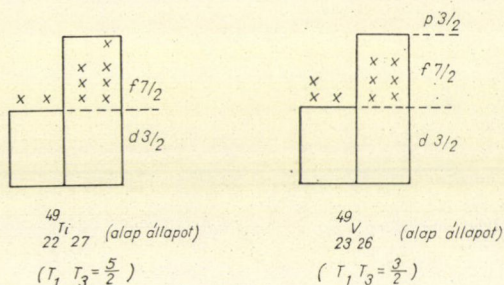
A relatív intenzitások alapján még nem sokat tudunk az analóg rezonancia γ bomlásáról. A $^{44}\text{Ca}(p, \gamma)^{45}\text{Sc}$ reakciónál a Γ_γ abszolút értékeket azelasztikus szórással segítségével állapítottuk meg. Az elasztikusan szórt protonokat detektáló fél-

vezető detektort 135° -ban helyeztük el. Az analóg rezonanciától távol $E_p = 2035$ keV-nél megmértük az elasztikusan szórt protonokat. Ebből a Rutherford hatáskeresztmetszet ismeretében a target vastagság számítható. A target vastagság itt a nyaláb energiaszórásánál kisebbnek adódott, így az energiaszórásnak megfelelően átlagoltuk a reakció hatáskeresztmetszetét. Ezek után a (p, γ) reakció hatáskeresztmetszetének kifejezésében a $\Gamma_p \Gamma_\gamma / \Gamma_{\text{teljes}}$ faktortól eltekintve minden tényező ismert. Feltételeztük, hogy $\Gamma_p \approx \Gamma_{\text{teljes}}$, mert a neutroncsatorna itt még zárt. Ennek alapján a Γ_p értéket a 1641,7 keV-es rezonanciára vonatkozóan az [50] referenciából véve, Γ_γ abszolút érték az analóg állapotból a 376 keV-es nivóra történő átmenetre $\Gamma_\gamma^{376} = 0,146$ eV. Az alapállapotra menő γ sugárzás esetén $\Gamma_{\gamma_0} = 0,06$ eV-nak adódott. Ha az analóg $\rightarrow 376$ keV gerjesztett állapot átmenetet $(3/2^-) \rightarrow (3/2^-)$ M1 átmenetnek tételezzük fel,* akkor ennek az átmenetnek az erőssége $1,5 \cdot 10^{-2}$ Weisskopf egység. A vizsgált átmenet tehát az egyrészezske átmenethez képest két nagyságrenddel tiltott. Az alapállapot átmenetre, ha ez E2 jellegű, 0,1 Weisskopf egységnyi erősséget kapunk.

Láthatjuk, hogy bár a spektrumnak egyik legerősebb vonala az analóg-anti-analóg átmenetnek megfelelő M1 átmenetből származik, abszolút erőssége mégis két nagyságrenddel az egyrészezske átmenet erőssége alatt van.

A ^{49}V mag

A ^{49}Ti mag ($Z=22, N=27$) állapotainak analógjait a ^{49}V ($Z=23, N=26$) magban kell keresnünk. A zárt $d_{3/2}$ törzson kívül itt most 3 proton és 6 neutron van az $f_{7/2}$ héjban. A 15. ábrán láthatjuk a megvalósuló konfigurációkat.



15. ábra. A ^{49}Ti szülő és a ^{49}V analóg magok alapállapotú konfigurációja

A ^{49}Ti alapállapot $J^\pi = 7/2^-$; $T=5/2$ analógját (p, γ) reakcióban nem tudjuk elérni itt sem, mert negatív bombázó energiánál kellene keresni. A ^{49}Ti első gerjesztett állapota $J^\pi = 3/2^-$; $T=5/2$ erősen jelentkezik (d, p) reakcióban és úgy tűnik, hogy a $2p_{3/2}$ egyrészezske erősség zöme erre a nivóra koncentrálódott ebben a magban.

* Az analóg-antianalóg E2 γ átmenet tiltott, az $f_{7/2}$ héjban érvényes effektív-töltés értékek alapján [16].

Várhatjuk tehát, hogy a megfelelő izobár analóg rezonancia is erős lesz. A ^{49}Ti magban $E_x=1374$ keV-nél van az első gerjesztett állapot. A ^{45}Sc magnál ismeretett módon a Coulomb energiakülönbség alapján az állapot analógját a ^{49}V magban $E_x=7,714$ MeV gerjesztési energiánál várjuk.

A $^{48}\text{Ti}(p, \gamma)$ ^{49}V reakció gerjesztési görbéje

A reakció gerjesztési görbáját $E_p=870$ – 2290 keV bombázó energiatartományban már vizsgálták részletesen [53, 54], és igen sok rezonanciát találtak. Ezek közül némelyek 5–10-szer nagyobb intenzitásúak, mint a szomszédos rezonanciák. A Coulomb energia becslésből és egymástól való távolságuk alapján ezeket mint analóg rezonanciákat lehetett azonosítani. $E_p=1007$ és 1013 keV-nél találtuk meg saját méréseinkben [11] is a ^{49}Ti első gerjesztett állapotának analógját, két komponensre felhasadva (16. ábra). A gerjesztési görbe $E_p=1320$ – 2140 keV közötti részét, amely szintén saját mérésünkéből származik a 17. ábra mutatja.

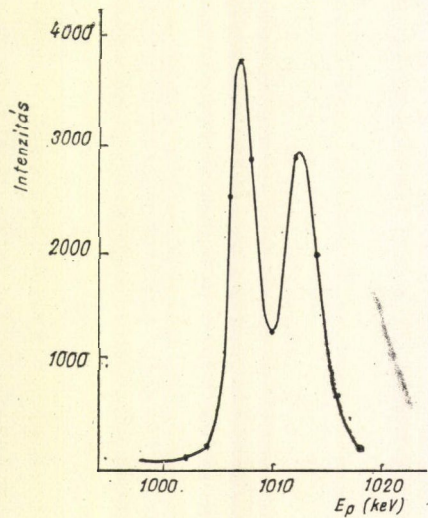
Az $E_p=1362$ keV-nél megjelenő rezonancia, a ^{49}Ti magban $E_x=1724$ keV gerjesztett állapot ($J^\pi=1/2^-$) analógja. A szülő és analóg mag szóban forgó nívóit láthatjuk a 18. ábrán, a ^{49}V alacsonyan fekvő gerjesztett állapotaital együtt.

Az $E_p=1388$ keV bombázó energiánál talált rezonanciának megfelelő szülő állapot nem egyértelműen azonosítható a ^{49}Ti magban. Erős rezonancia jelenik meg a gerjesztési görbében $E_p=1566$ keV és $E_p=1579$ keV bombázó energiáknál. A szülő magban a megfelelő energiatartományban nem ismerünk gerjesztett állapotot, így ha ezek analóg rezonanciák, akkor szülő állapotaik nem ismertek, valószínűleg különleges szerkezetük miatt.

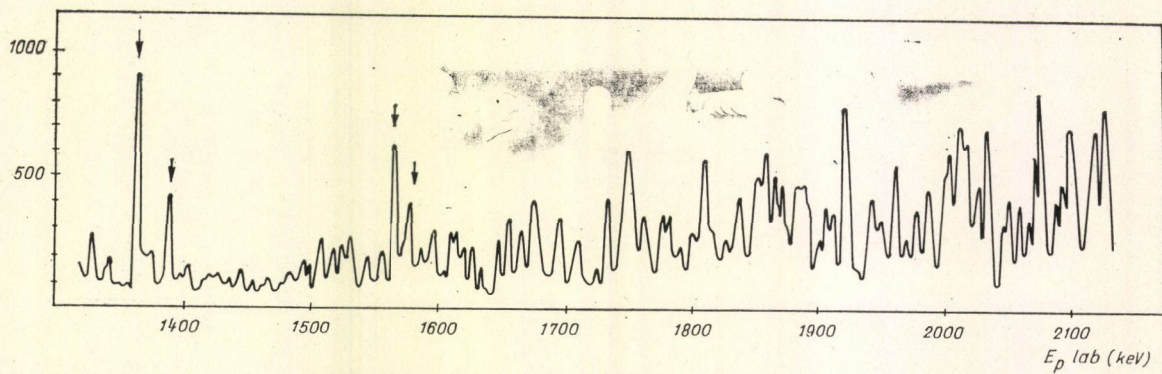
Spektrum mérések

Részletes γ spektrum vizsgálatokat végeztünk az $E_p=1007$ és 1013 keV, $E_p=1362$ keV, $E_p=1388$ keV $E_p=1566$ keV és $E_p=1579$ keV bombázó energiáknál talált rezonanciákon [11, 55]. A 19., 20., 21., 22., 23. és 24. ábrákon láthatók a Ge(Li) detektorral mért γ spektrumok. A $2p_{3/2}$ egyrészcseke állapot analógjának megfelelő 1007 és 1013 keV rezonanciák γ bomlását a IX. táblázatban foglaltuk össze a $p_{1/2}$ típusú 1362 keV rezonanciával együtt. Látjuk, hogy a két vonalra felhasadt $3/2^-$ analóg rezonancia γ bomlás szempontjából különbözően viselkedik. Bizonyos átmenetek az egyik rezonanciánál megtalálhatók, míg a másikon hiányoznak. A ^{45}Sc magban levő 376 keV-es gerjesztett állapothoz hasonló szerepet játszik itt a 153 keV nívó, amely szintén a $2p_{3/2}$ egyrészcseke állapot képviselője, bár igen kis mértékben. A X. táblázat tartalmazza a $^{48}\text{Ti}(^3\text{He}, d)$ ^{49}V mérés eredményeit és a $^{50}\text{Cr}(t, \alpha)$ ^{49}V mérésből származó adatokat, a $2p_{3/2}$ gerjesztésre vonatkozóan [56, 57].

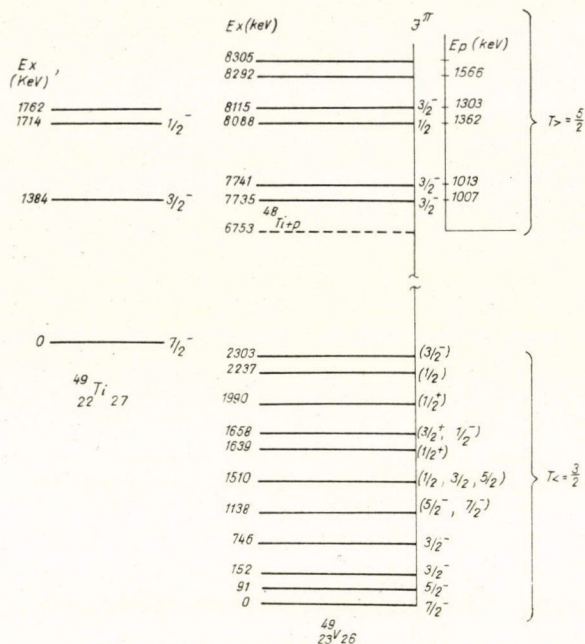
Magasabb gerjesztési energiáknál is találtak még olyan nívókat, amelyekre a befogott proton pályamomentuma $l_p=1$, de ezeket nem tudják biztonsággal $p_{3/2}$ gerjesztésekkel azonosítani, itt már $p_{1/2}$ gerjesztések is előfordulnak. A megtalált $p_{3/2}$ nívók erősségeinek összege nem adja ki a várt egyrészcseke erősséget, így azt kell hinnünk, hogy az több gyengén gerjesztett nívóra oszlik szét. A legerősebb $p_{3/2}$ egyrészcseke jellegű nívó az $E_x=2312$ keV-nél talált állapot. Az analóg állapot-



16. ábra. $^{48}\text{Ti}(p, \gamma)^{49}\text{V}$ reakció, $E_p = 1007$ és 1013 keV rezonanciák



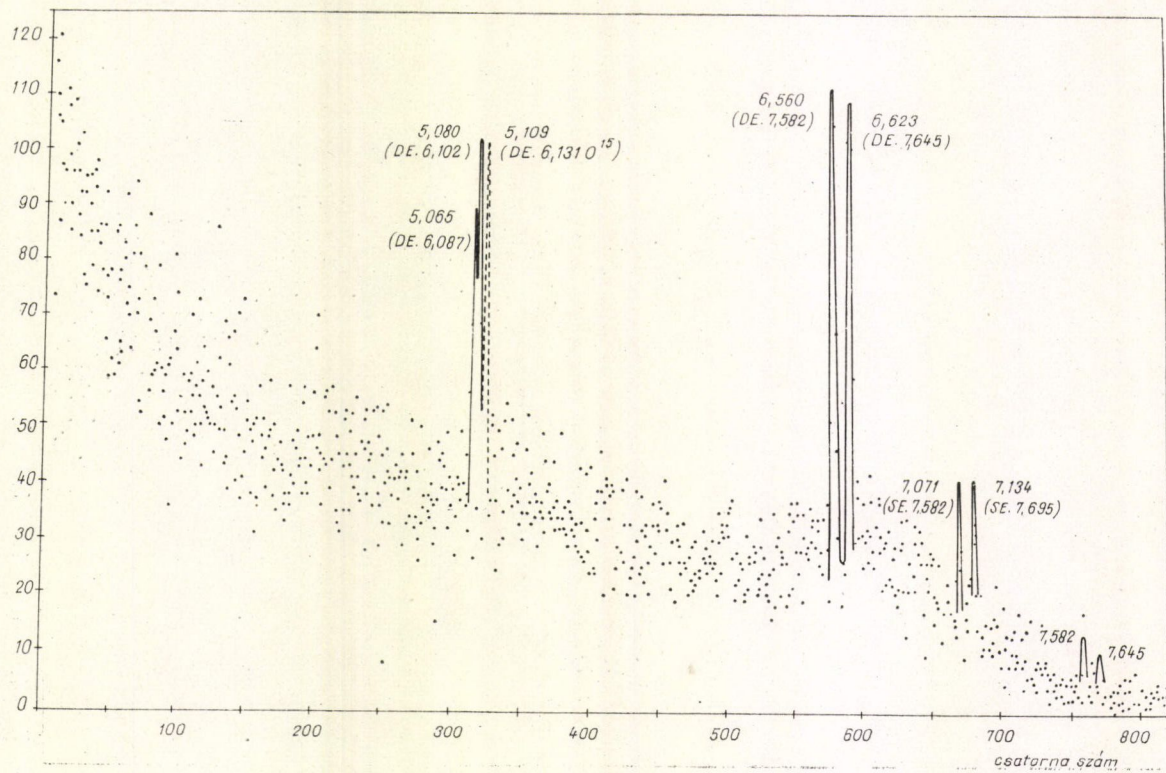
17. ábra. $^{48}\text{Ti}(p, \gamma)^{49}\text{V}$ reakció gerjesztési görbéje

18. ábra. ^{49}Ti és ^{49}V magok nivósémája

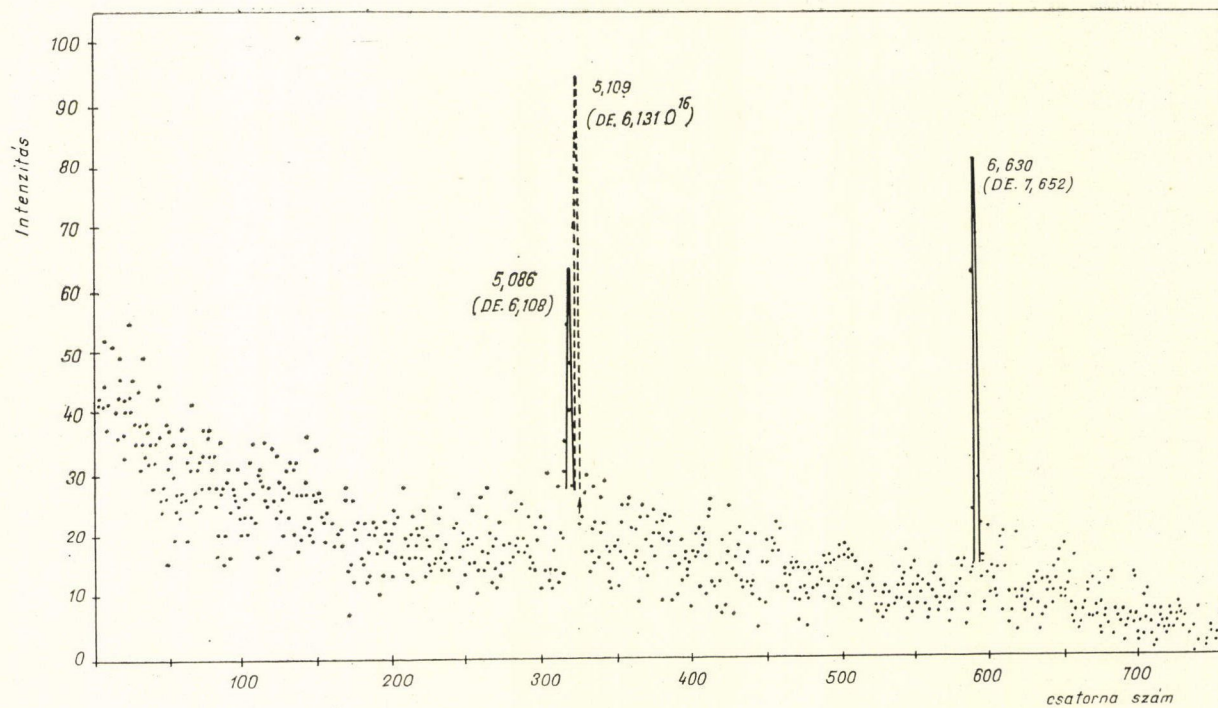
IX. TÁBLÁZAT

Rezonancia nívó energia E_x (MeV)	J^π Rezonancia	Végállapot		Relatív intenzitás	Multipolaritás	Γ_γ (eV)	Weiss- kopf (eV)
		E_x keV	J^π				
7,735	$3/2^-$	0	$7/2^-$	6			
		90	$5/2^-$	113			
		153	$3/2^-$	100	M1	0,15	9,56
		1633	$1/2^+$	30	E1	0,13	9,25
		1648	$1/2^+, 3/2^-$	20	E1	0,04	205,0
7,741	$3/2^-$	0	$7/2^-$	9			
		90	$5/2^-$	100			
		153	$3/2^-$	9	$0,998\text{M1} + 0,002\text{E2}^*$	$0,22\text{M1} + 0,0004\text{E2}$	$\text{M1}:9,6$
		1633	$1/2^+$	30	M1	0,02	$\text{E2}:0,23$
		1648	$1/2^-, 3/2^-$	7	E1	0,07	9,3
8,088	$1/2^-$	0	$7/2^-$	5	M1	0,02	206,0
		90	$5/2^-$	7			4,8
		153	$3/2^-$	100			
		1633	$1/2^+$	3	M1	1,7	10,6
		1648	$1/2^-, 3/2^-$	4	E1	0,026	242,0
					M1	0,035	5,6

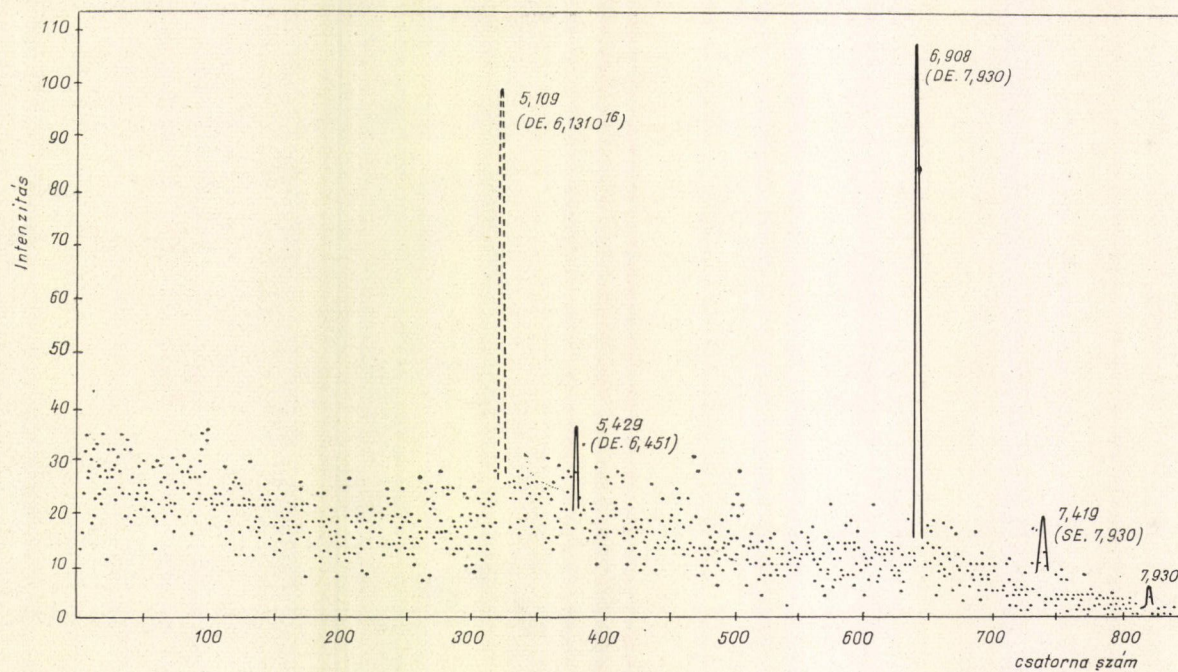
* Az M1/E2 keveredés saját szögeloszlás mérésünkből [11] származik.



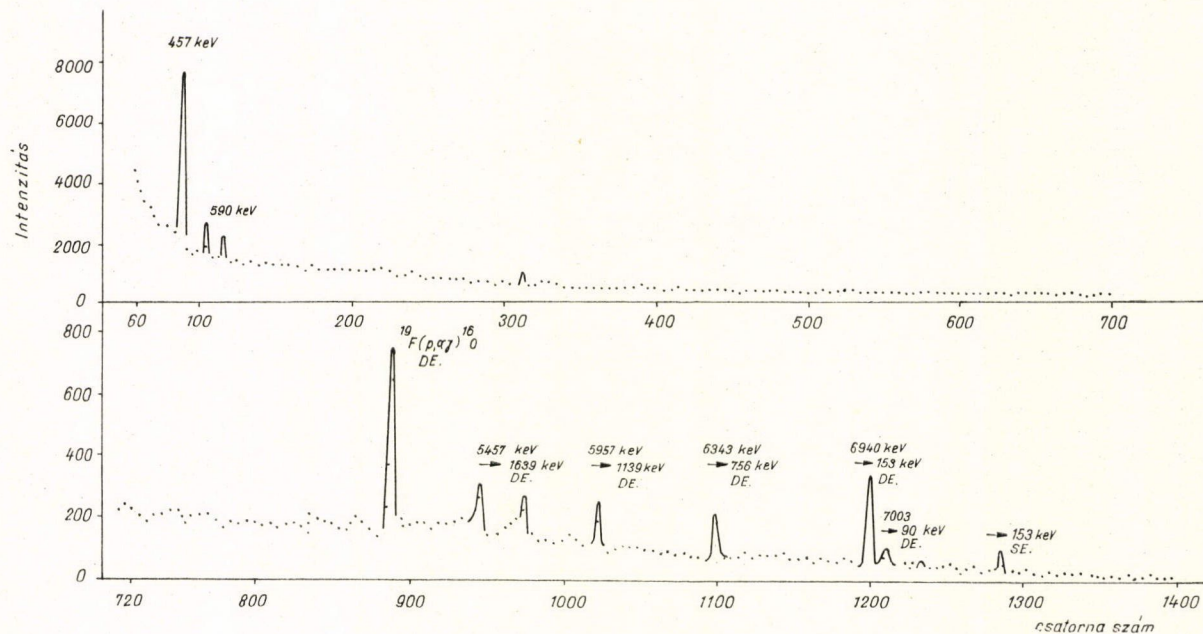
19. ábra. $^{48}\text{Ti}(p, \gamma) ^{49}\text{V}$ reakció, γ spektrum $E_p = 1007$ keV-nél



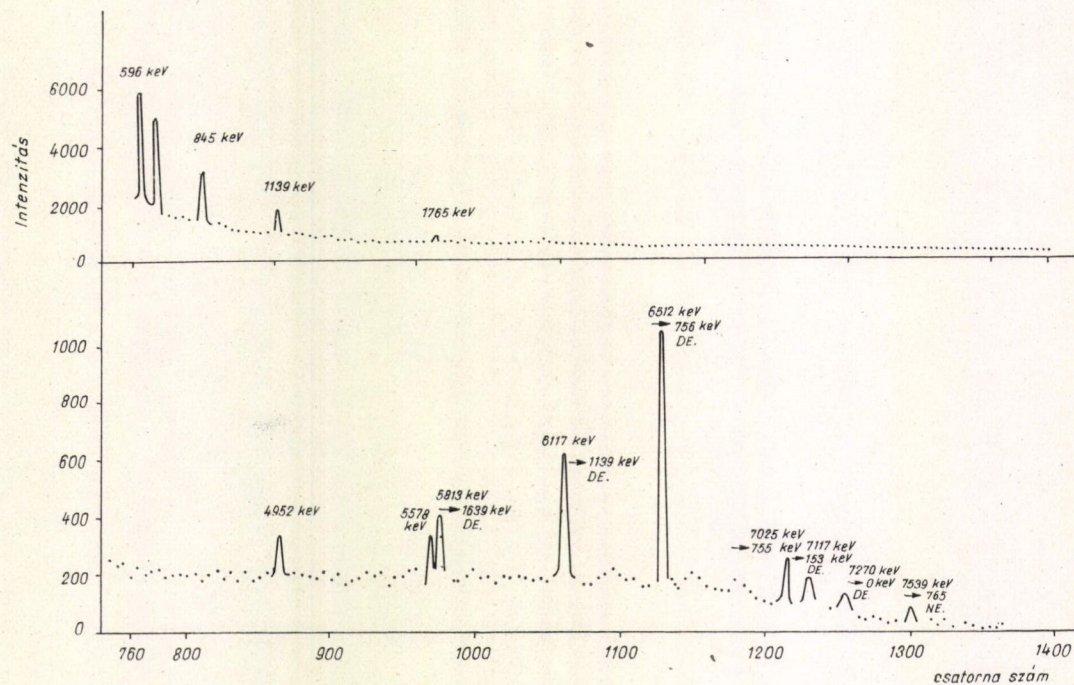
20. ábra $^{48}\text{Ti}(p, \gamma)^{49}\text{V}$ reakció, γ spektrum $E_p = 1013$ keV-nél



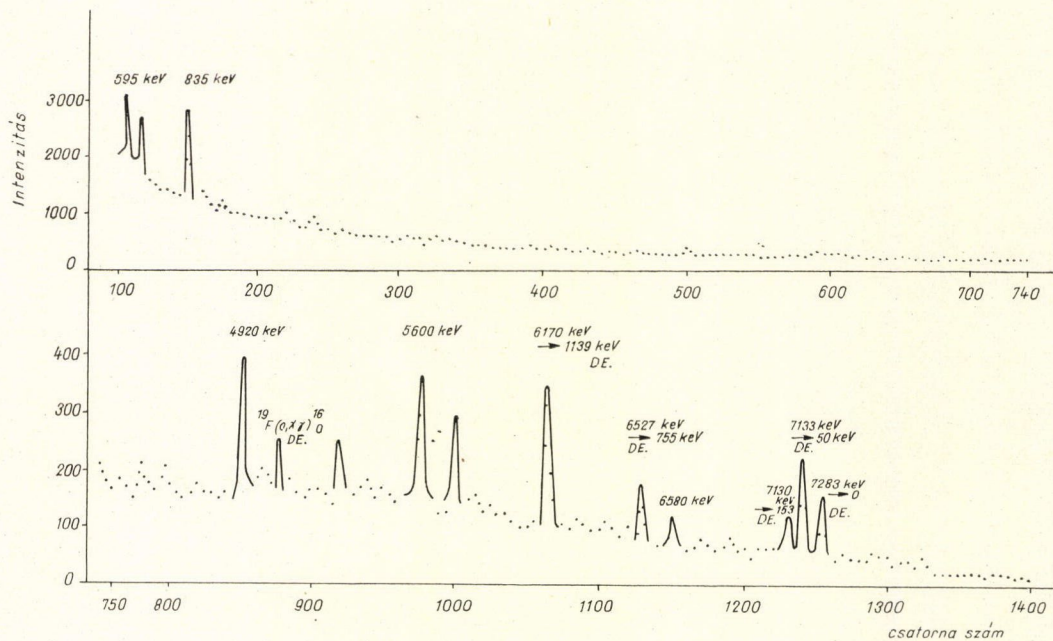
21. ábra. $^{48}\text{Ti}(p, \gamma) ^{49}\text{V}$ reakció, γ spektrum $E_p = 1362$ keV-nél



22. ábra. $^{48}\text{Ti}(p, \gamma)^{49}\text{V}$ reakció, γ spektrum $E_p = 1388$ keV-nél



23. ábra. $^{48}\text{Ti}(p, \gamma)^{49}\text{V}$ reakció, γ spektrum $E_p = 1566$ keV-nél



24. ábra. $^{48}\text{Ti}(p, \gamma)^{49}\text{V}$ reakció, γ spektrum $E_p = 1579$ keV-nél

X. TÁBLÁZAT

Végállapot E_x (keV)	I_p	J^π	^{48}Ti (^3He , d) ^{49}V		(t, α) C ^{25}S
			(2J+1) C ^{25}S (a)	(2J+1) C ^{25}S (b)	
153	1	3/2 $^-$	0,07	0,17	0,12
*1664	1	3/2 $^-$	0,38	0,50	gyenge
2279	1	3/2 $^-$	0,35	0,55	gyenge
2312	1	3/2 $^-$	0,67	1,31	0,02

* Általunk 1658 keV talált nivå

a) Ref. 56

b) Ref. 57.

ból idevezető γ átmenet olyan gyenge, hogy a mi spektrumainkban nem volt látható. A felhasadt antianalóg állapot energiában legalacsonyabban fekvő tagja az igen kicsi spektroszkópiai faktorral rendelkező 153 keV-es gerjesztett állapot. Az erre vezető M1 átmenet az $E_p=1007$ keV-es rezonancia spektrumának egyik legerősebb vonala. Ennek ellenére az átmenet abszolút erőssége, amint azt a táblázatban feltüntettük: $1,4 \cdot 10^{-2}$, Weisskopf egységekben kifejezve.

Az $E_p=1362$ keV rezonanciánál szintén nagy intenzitású γ átmenetet találtunk a 153 keV-es nivóra, de itt szó sem lehet analóg-antianalóg átmenetről, mivel ez a rezonancia a $p_{1/2}$ egyrészecske gerjesztés analógja. Az $E_p=1388$ keV rezonancián mért spektrumból kapott γ bomlási intenzitásokat a XI. táblázatban tüntettük fel.

XI. TÁBLÁZAT

E_x (keV)	J^π	Átmenet jellege	Γ_γ (eV)	$\Gamma_{\gamma w}$
0	7/2 $^-$		0,006	
90	5/2 $^-$		0,011	
153	3/2 $^-$	M1	0,089	10,6
753	3/2 $^+$	E1	0,040	310,0
1139	(5/2 $^-$, 7/2 $^-$)		0,034	
1639	1/2 $^+$	E1	0,026	246,0

(E_x oszlop a végállapotok gerjesztési energiáit tartalmazza.)

Az $E_p=1388$ keV rezonancia spin és paritás értéke $J^\pi=3/2^-$ [58]. Ennél a rezonanciánál is a spektrum legerősebb vonala a 153 keV végállapotra vezető átmenetből származik. Ennek ellenére itt sem az analóg-antianalóg M1 átmenetről van szó. Az $E_p=1388$ keV-es rezonanciát nem tekinthetjük $p_{3/2}$ egyrészecske gerjesztés analógiának. Ha a ^{49}Ti magban levő $E_x=1762$ keV nivó lenne a szülő állapot, akkor az energiakülönbség az $E_p=1362$ keV rezonancia szülő állapota $E_x=1724$ keV-es nivó és e között $\Delta E_x=38$ keV, míg a két rezonancia távolsága $\Delta E_p=26$ keV. Az analóg állapot feltevésnek ellene mond az is, hogy ha az $E_x=1762$ keV gerjesztett állapot a ^{49}Ti magban $p_{3/2}$ egyrészecske gerjesztés, akkor a neki megfelelő átmenet (d, p) stripping reakcióban meg kell jelenjen, de ez nem következik be [59].

Megvizsgáltuk még a gerjesztési görbében $E_p=1566$ és 1579 keV-nél talált igen erős rezonanciák spektrumait. Ennek a két rezonanciának nem ismeretes a spin,

paritás értéke, azt sem tudjuk, hogy analóg rezonanciák-e vagy sem. A szülő magban a megfelelő gerjesztési energiáknál nem találtak nívót, sem stripping sem „pick-up” reakcióban [57, 59]. A spektrum vonalak intenzitását a XII. táblázat mutatja.

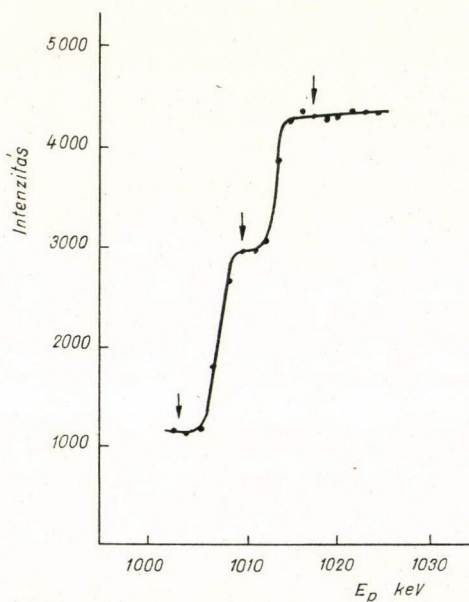
XII. TÁBLÁZAT

^{49}V E_x (keV) J^π	E_p (keV)	1566	1579
		$N_\gamma/N_p \cdot 10^{-12}$	$N_\gamma/N_p \cdot 10^{-12}$
0	$7/2^-$	20	20
90	$5/2^-$	6	32
153	$3/2^-$	27	11
753	$3/2^+$	126	18
1139	$5/2^-, 7/2^-$	61	35
1639	$1/2^+$	25	—

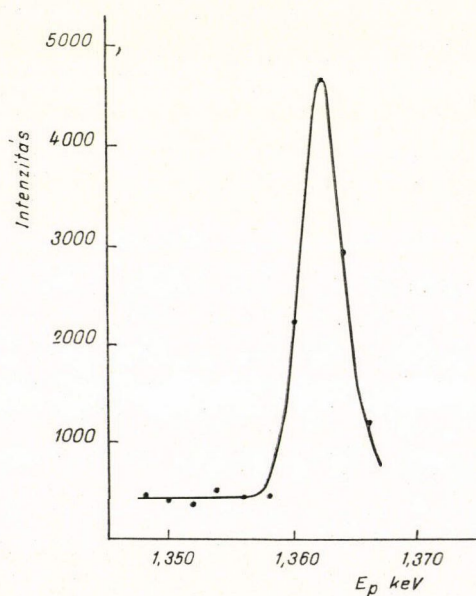
Ennek alapján az $E_p=1566$ keV rezonancia valószínűleg pozitív paritású, az $E_p=1579$ keV-nél talált rezonanciára pedig ilyen alapon nem lehet feltevéseket tenni.

Γ_γ abszolút értékek

A Γ_γ abszolút értékeket eV-ban kifejezve szintén feltüntettük a táblázatokban az 1007, 1013 és 1362 meg 1388 keV-es rezonanciák γ átmeneteire.



25a ábra



25b ábra

A $^{48}\text{Ti}(p, \gamma)^{49}\text{V}$ reakció vastag targeten mért gerjesztési görbéi, az $E_p=1007$, 1013 és 1362 keV rezonanciák esetén

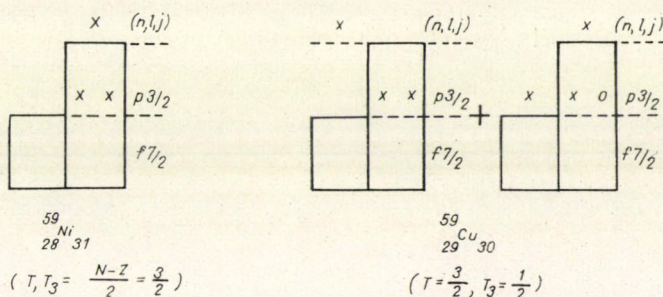
A Γ_γ értékek meghatározására a $^{48}\text{Ti}(p, \gamma) ^{49}\text{V}$ reakció esetén a vastag targon ten mért hozamot használtuk fel. A vastag targettel mért gerjesztési görbékét láthatjuk a 25a és 25b ábrákon a kérdéses rezonanciákra vonatkozóan. A Γ_γ értékeket a hozamból az alábbi összefüggés alapján számítottuk, $\Gamma_p \sim \Gamma_t$ feltevéssel. (A neutron csatorna itt minden rezonanciára vonatkozóan zárt.)

$$\frac{2\varepsilon}{\lambda^2} Y(\infty, \infty) = \frac{2J+1}{(2i_1+1)(2J_0+1)} \frac{\Gamma_p \Gamma_\gamma}{\Gamma_t}$$

Az összefüggésben szereplő ε a céltárgy anyagára jellemző fékezési hatáskeresztmetszet, $\text{keV cm}^2/\text{atom}$ dimenzióval, λ^2 az E_p bombázó energiával rendelkező protonok hullámhossza, cm^2 dimenzióval, $Y(\infty, \infty)$ a γ hozam, i_1 a bombázó részecske spinje, J_0 a targetmag spinje, J a végállapot spinje, Γ_p a rezonanciának proton befogás, ill. elbomlásra vonatkozó szélessége, Γ_t a teljes szélesség.

A ^{59}Cu mag

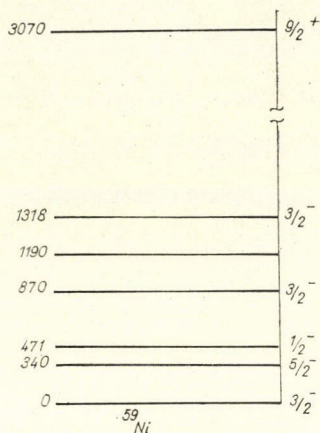
Az $f_{7/2}$ héjban tapasztalt bonyolult konfigurációjú állapotok helyett, a $p_{3/2}$ héj elején levő magoknál ismét egyszerűbb szerkezetű állapotokat figyelhetünk meg. A $Z=28$ és $N=28$ elérésénél kétszer mágikus maggal van dolgunk, várhatjuk tehát, hogy a zárt héjakon kívüli néhány nukleon ebben a tartományban egyszerű konfigurációkba rendeződik. Igen vonzó target ilyen szempontból a ^{58}Ni , amelyben $Z=28$ proton és $N=30$ neutron található. Egy proton hozzáépülésével az $^{59}\text{Cu}_{30}$ magot érjük el, ahol az $^{58}\text{Ni}_{31}$ mag állapotainak analógiát várjuk. A 26. ábrán látható a szülő és analóg konfigurációk vázlata.



26. ábra. Szülő állapot a ^{59}Ni magban és a megfelelő analóg állapot a ^{59}Cu -ben

A ^{59}Ni magban levő állapotok analóg állapotait keressük tehát a ^{59}Cu magban. A módszer itt is ugyanaz mint egyéb magok esetében. Azt kell megtalálnunk, hogy melyek azok az állapotok a ^{59}Ni magban, amelyek egyrészecske-gerjesztés jellegűek, mert várható, hogy ezek analóg állapotai jelentkeznek, majd a ^{59}Cu magban. A kérdés eldöntésére először tehát a $^{58}\text{Ni}(d, p) ^{59}\text{Ni}$ magreakció eredményeit kell szemügyre vennünk [60]. A ^{59}Ni mag szóban forgó gerjesztett állapotait a 27. ábrán találhatjuk meg.

Nagy spektroszkópai faktorról jelenik meg a ^{59}Ni alapállapot, amely $p_{3/2}$ egyrészecske állapot. Ennek megfelelő analóg állapot $E_x=3,9$ MeV gerjesztési energiánál van a ^{59}Cu magban, a $(^3\text{He}, d)$ magreakció [61] eredményei szerint, mert $l_p=1$ -el erős átmenet vezet erre a nivóra, (p, γ) reakcióban ez túlságosan alacsony bombázó energiánál $E_p \sim 450$ keV jelenne meg, mert a (p, γ) reakció Q értéke 3,42 MeV.



27. ábra. A ^{59}Ni mag gerjesztett állapotai

A gerjesztett nivók között $l_n=1$ értékkel talált állapotok lehetnek $p_{3/2}$ és $p_{1/2}$ egyrészecske gerjesztések. A J^π értékek eldöntésére nem elég az l_n ismerete. $^{58}\text{Ni}(n, \gamma)$ ^{59}Ni reakcióból, $\gamma-\gamma$ szöggkorreláció méréssel [62] határozták meg egy néhány nivó spinjét. E szerint a mérés szerint az ^{59}Ni -ben $E_x=471$ keV nivó $1/2^-$, és 1318 keV nivó $3/2^-$, spin-paritás értékkel rendelkezik. Mindkét nivó elég erősen gerjed a (d, p) reakcióban, és a nekik megfelelő állapotok a ^{59}Cu magban szintén megjelennek $(^3\text{He}, d)$ reakcióban $l_p=1$ pályamomentummal befogott protonokkal. A 471-keV-es szülő állapot analógiát (p, γ) reakcióban is megtalálták $E_p=947$ keV bombázó energiánál [63]. Kérdéses viszont, hogy az $E_p=1843$ keV rezonancia a (p, γ) reakcióban, amelyet a generátor energia hitelesítésére is használtunk, tekinthető-e a ^{59}Ni 1318 keV nivó analógiájának. A rezonanciából a ^{59}Cu alapállapotra menő

γ sugárzás szögeloszlását izotrópnak találták [63]. Ez csak úgy lehet, ha a rezonancia spinje $1/2$, ami ellentmond az előbb említett adatoknak, vagy ha a $3/2$ spint fogadjuk el akkor az átmenet nem tiszta $M1$, hanem $M1+E2$ keveredés van, ami 10%-os $E2$ keveredéssel előidézhethet izotrópszögeloszlást.

A $^{58}\text{Ni}(d, p)$ ^{59}Ni reakcióban legnagyobb spektroszkópai erősséggel megjelenő állapot $E_x=3070$ keV-nél levő nivó. A befogott neutron pályamomentuma itt $l_n=4$. Ez tehát egy $g_{9/2}$ egyrészecske gerjesztésnek megfelelő neutron állapot. Ennek az analógiát megtalálták $(^3\text{He}, d)$ reakcióban is. A ^{59}Cu magban $E_x=6,90$ MeV-nél levő állapotra $l_p=4$ értéket kaptak a szögeloszlás mérések alapján [64].

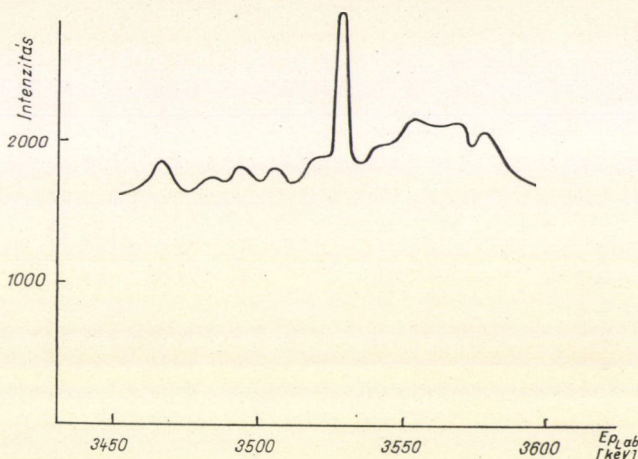
A XIII. táblázat foglalja össze a ^{59}Ni magban levő lehetséges szülő állapotokat, a (d, p) reakcióból kapott spektroszkópai információkkal együtt és a nekik megfelelő analóg állapotokat a ^{59}Cu magban $(^3\text{He}, d)$ és (p, γ) mérések alapján.

XIII. TÁBLÁZAT

$^{58}\text{Ni}(d, p)$ ^{59}Ni [60]				$^{58}\text{Ni}(^3\text{He}, d)$ ^{59}Cu [61]				$^{58}\text{Ni}(p, \gamma)$ ^{59}Cu
E_x (keV)	l_n	J^π	$(2J+1)S$	E_x (keV)	l_p	J^π	$(2J+1)C^2S$	E_p (keV)
0	1	$3/2^-$	2,77	3904	1	$3/2^-$	0,6	450
471	1	$1/2^-$	1,41	4364	1	$1/2^-$	0,32	947
1318	1	$3/2^-$	0,60	5248	1	$3/2^-$	0,12	1843
3071	4	$9/2^+$	7,90	6900	4	$9/2^+$		3531

A $^{58}\text{Ni}(p, \gamma) ^{59}\text{Cu}$ reakció gerjesztési görbéje

Butler és Gossett az $E_p = 750\text{--}1850$ keV bombázó energia tartományban NaJ(Tl) szcintillációs számlálóval vizsgálták a reakciót [63]. Szélesebb energiatartományban vették fel a gerjesztési görbét Carver és Jones [65], akik a ^{59}Cu mag β^+ aktivitásának mérését használták fel a reakció bekövetkezésének detektálására. Mi az 1843 keV-es rezonancián mértünk Ge(Li) detektorral spektrumot (9. ábra), azután az $E_p = 3450\text{--}3600$ keV bombázó energiatartományban mértünk gerjesztési görbét, $E_\gamma > 2,7$ MeV energiájú γ sugárzást detektálva integrálisan. Ez a gerjesztési görbe látható a 28. ábrán.



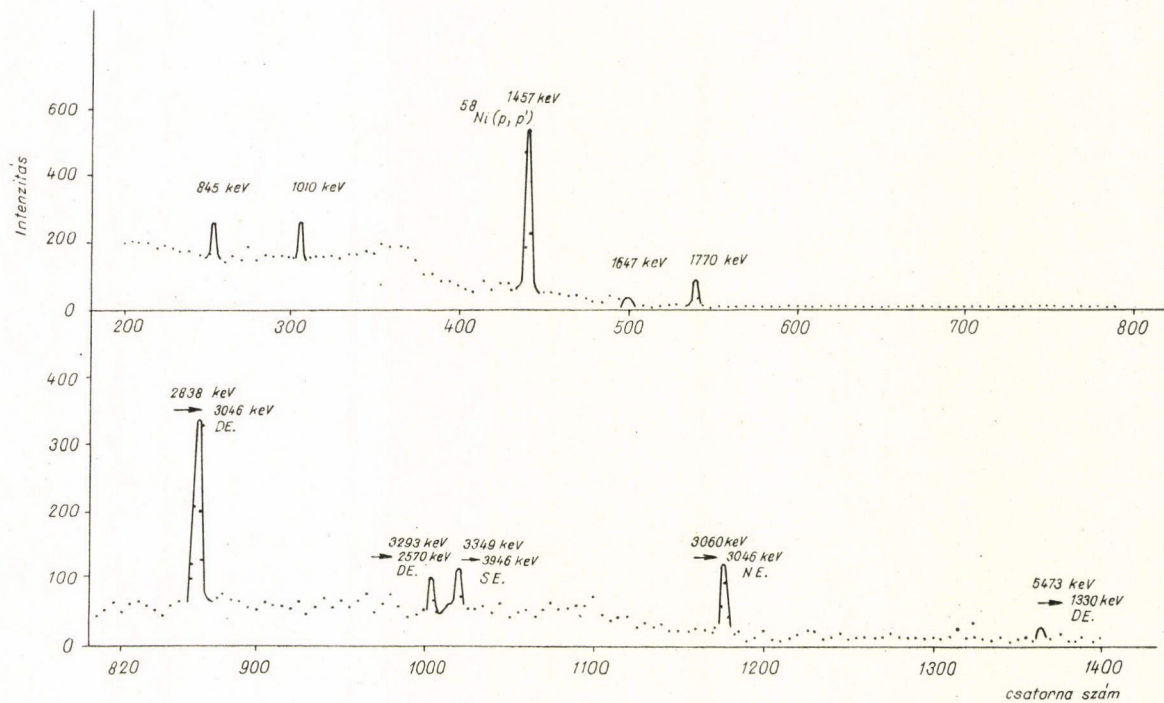
28. ábra. $^{58}\text{Ni}(p, \gamma) ^{59}\text{Cu}$ reakció gerjesztési görbéje, a $g_{9/2}$ analóg rezonanciával

A már említett Coulomb energia becslés alapján $g_{9/2}$ egyrészecske állapotnak megfelelő analóg rezonanciát $E_p = 3560$ keV bombázó energiánál vártuk. Az ábrán látható gerjesztési görbén ez a rezonancia $E_p = 3531$ keV-nél található. Ez a ^{59}Cu magban $E_x = 6,89$ MeV gerjesztési energiának felel meg. Jó egyezésben a $(^3\text{He}, d)$ reakcióból kapott gerjesztési energia értékkel a $g_{9/2}$ proton állapotra vonatkozóan.

Spektrum mérések

Az $E_p = 1843$ keV rezonancián mért spektrum bonyolult sok átmenetet tartalmaz, de legerősebb átmenet a rezonanciából az alap és első gerjesztett állapotra vezető γ átmenet. Mindkettő valószínűleg $M1$ átmenet.

A 3531 keV rezonancia spektrumában (lásd a 29. ábrát) a legerősebb átmenet az analóg állapotból az $E_x = 3046$ keV gerjesztési energiánál található $9/2^+$ spinű és paritású nivóra vezető γ átmenet. Ez az állapot éppen a $g_{9/2}$ analóg állapot ($T=3/2$) antianalóg megfelelője ($T=1/2$), ami $(^3\text{He}, d)$ reakcióban szintén erősen jelentkezik $l_p = 4$ és $(2J+1) C^2 S = 3,1$ értékkel [61]. Meg kell jegyeznünk, hogy ^{59}Cu magban ezen a két $l_p = 4$ állapoton kívül nem találtak ilyen típusú nivót, tehát a $g_{9/2}$ erősség



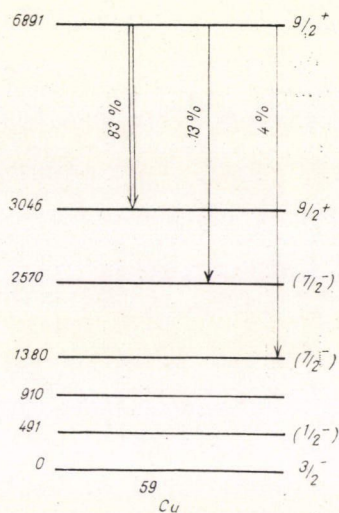
29. ábra. $^{58}\text{Ni}(p, \gamma)^{58}\text{Cu}$, γ spektrum, $E_p = 3531$ keV-en

nincs felhasadva több nívóra sem az analóg, sem az antianalógállapot esetén. A 30. ábrán láthatjuk a $g_{9/2}$ analóg rezonancia γ bomlását. A spektrum alapján meg tudtuk határozni az elágazási arányokat is. A γ átmenetek 83%-a megy a 3046 keV $9/2^+$ nívóra, 13%-a a 2570 keV-nél levő általunk talált nívóra, amelynek létezését az is igazolja, hogy a spektrumban megtaláltuk a lebomlásának megfelelő vonalakat is.

Γ_γ abszolút értékek

A rezonanciákon felvett spektrumok alapján meghatározott γ hozamokból kiszámítottuk a Γ_γ értékeket: a $^{48}\text{Ti}(p, \gamma) ^{49}\text{V}$ reakciónál ismertetett módszerrel. A $\Gamma_p \sim \Gamma_{\text{teljes}}$ feltevés itt is jogosult, mert a neutron csatorna ennél a reakciónál is zárt a vizsgált gerjesztési energia tartományban. Eredményeinket a XIV. táblázat foglalja össze.

Az 1843 keV rezonancia spin értékét nem tudjuk biztosan, amint azt tárgyaltuk, itt feltételeztük, hogy $3/2^-$. Ha ez valóban így van, akkor a Weisskopf egységben kifejezett $0,9 \Gamma_\gamma$ érték erős analóg-antianalóg $M1$ átmenet jelenlétére utal, mert a $p_{3/2}$ egyrészecske gerjesztési antianalóg állapotának jelen esetben a ^{59}Cu alapállapot tekinthető. ($^3\text{He}, d$) reakcióban $lp=1$ és $(2J+1) C^2 S=2,1$ értékkel jelentkezik.



30. ábra. A ^{59}Cu mag nívósémája

XIV. TÁBLÁZAT

Rezonancia E_p (keV)	J^π	Végállapot E_x (keV)	J^π	Átmenet jellege	Γ_γ (eV) mért.	$\Gamma_{\gamma W}$ (eV)	$\Gamma_\gamma/\Gamma_{\gamma W}$
1843	$3/2^-$	0	$3/2^-$	M1	2,69	3,0	0,9
1843	$3/2^-$	490	$1/2^-$	M1	0,25	2,2	0,11
3531	$9/2^+$	3046	$9/2^+$	M1	1,86	1,2	1,5
3531	$9/2^+$	2570	$7/2^-$	E1	0,37	89,5	$4,1 \cdot 10^{-3}$

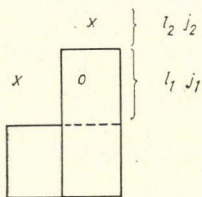
A $g_{9/2}$ analóg állapotról az antianalóg állapotra vezető $M1$ átmenet páratlan erősséggel jelenik meg ebben a tömegszám tartományban. A mérésben talált 1,5 Weisskopf egységnyi Γ_γ értékhez hasonló nagy átmeneti erősségeket csak az $s-d$ héjban találtak.

III. Diszkusszió

Méréseink után rendelkezésünkre álló kísérleti adatok analízise előtt érdemes röviden áttekinteni azt a gondolatmenetet, amely a ^{49}Sc -ban talált $p_{3/2}$ analóg rezonancia $M1$ bomlásának tiltottságát magyarázza. A könnyű magokkal ellentétben, az $A > 40$ tömegszám tartományban már nagyobb a nívósűrűség, nagyobb a valószínűség arra, hogy az adott konfigurációnak megfelelő energiánál több olyan el-

térő szerkezetű állapot legyen, amelyek keveredést hozhatnak létre. A törzs polarizációjából származó állapotok jelenlétét és hatását analóg-antianalóg átmenetekre *S. Maripuu* tárgyalta [37]. Megfontolásait páratlan tömegszámú magokra végezte.

Legyen az utolsó nukleon $l_2 j_2$ héjmodell pályán, és csatolódjon egy olyan törzshöz, amely kétszer mágikus részt és az $l_1 j_1$ héjban páros számú n db nukleont tartalmaz. (Lásd a 31. ábrát.) A törzs spinje és izospinje J_0 és T_0 .



31. ábra

Az analóg állapot hullámfüggvényének fő része akkor:

$$\Psi_1 = [(j_1^n)_{J_0=0, T_0} \otimes j_2]_{j_2, T_0+\frac{1}{2}}.$$

Az antianalóg konfiguráció ennek megfelelően:

$$\Psi_2 = [(j_1^n)_{J_0=0, T_0} \otimes j_2]_{j_2, T_0-\frac{1}{2}}.$$

A különféle törzspolarizációból származó állapotok hullámfüggvénye akkor:

$$\varphi_{J_0} = [(j_1^n)_{J_0, T_0-1} \otimes j_2]_{j_2, T_0-\frac{1}{2}}.$$

Az analóg \rightarrow antianalóg $M1$ átmenetre vonatkozó redukált átmeneti valószínűség kifejezése ezek között az állapotok között az alábbi formában írható fel:

$$B(M1) = |a_1 a_2 \langle \Psi_2 | \Omega(M1) | \Psi_1 \rangle + a_1 \sum_{J_0} \beta_{J_0} \langle \Phi_{J_0} | \Omega(M1) | \Psi_1 \rangle|^2, \quad (\text{III.1})$$

ahol a_1 , a_2 és β_{J_0} együtthatók az egyes konfigurációk amplitúdóit reprezentálják, $\Omega(M1)$ pedig egyrészezske $M1$ operátorok összege. Elvileg az összegezés minden antiszimmetrikus $J_0 \neq 0$, $T_0 - 1$ konfigurációra vonatkozik. Gyakorlatban $M1$ átmenet esetén csak a $J_0 = 1$, $T_0 - 1$ konfiguráció ad járulékot az átmeneti mátrix eleméhez $B(M1)$ végleges alakja a megfelelő átalakítások után a következő:

$$B(M1) = \frac{1}{2j_2+1} \left[a_1 a_2 \left\{ \frac{4}{3} \frac{1}{(2j_2+1)} \frac{T_0}{(2T_0+1)^2} \right\}^{1/2} \langle l_2 j_2 t = \frac{1}{2} | \Omega_V(M1) | l_2 j_2 t = \frac{1}{2} \rangle + \right. \\ \left. + a_1 \beta_{1n} \left\{ \frac{1}{9} \frac{1}{(2j_1+1)} \frac{2T_0-1}{T_0(2T_0+1)} \right\}^{1/2} C_1 C_2 \langle l_1 j_1 t = \frac{1}{2} | \Omega_V(M1) | l_1 j_1 t = \frac{1}{2} \rangle \right]^2. \quad (\text{III.2})$$

C_1 és C_2 részleges apasági együtthatók:

$$C_1 = \langle j_1^n(1, T_0-1) | j_1^{n-1}(j_1, T_0-\frac{1}{2}) \rangle$$

és

$$C_2 = \langle j_1^n(0, T_0) | j_1^{n-1}(j_1, T_0-\frac{1}{2}) \rangle.$$

Az (III. 2) kifejezés első tagja egyszerű nukleon átmenetet ír le az $l_2 j_2$ héjban, spin nélküli törzs mellett. A második tag az n darab törzsbeli nukleon járuléka, átrendeződés az $l_1 j_1$ pályán. Az $\Omega(M1)$ kifejezésben a V index az operátor izovektor részét jelöli. Az itt szereplő redukált mátrixelemek előjele a $(g_p - g_n)$ faktor előjelétől függ (I. 17), ami az $l + \frac{1}{2}$ -es pályákon pozitív és az $l - \frac{1}{2}$ -es pályákon negatív [38]. Az átmeneti valószínűség értékét azonban nemcsak ez határozza meg. Fontos szerepe van az a_2 és β_1 amplitúdóknak. Ezek előjele viszont az $l_2 j_2$, és $l_1 j_1$ pályákon levő

nukleonok között levő kétrészecske kölcsönhatástól függ. Az $n=2$ esetben, ha elsőrendű perturbációs közelítést alkalmazunk

$$\frac{a_2}{\beta_1} = \frac{\langle \Psi_2 | V_{12} | \Phi_1 \rangle}{E_0 - E_2},$$

ahol V_{12} a legutolsó nukleon és a törzs nukleonjainak kölcsönhatását képviseli, E_0 a kevert antianalóg állapot energiája, E_2 pedig a nem perturbált Ψ_2 konfiguráció energiája lenne. $E_0 - E_2$ így mindig negatív, a mátrixelem pedig pozitív, ha j_1 és j_2 mindkettő $l + \frac{1}{2}$ vagy $l - \frac{1}{2}$ értékűek, másképpen negatív. Az első esetben a (III. 2) kifejezés két tagja kiolthatja egymást, és az átmenet valószínűsége nagyon lecsökkenhet, míg olyan esetekben, ahol j_1 és j_2 közül az egyik $l + \frac{1}{2}$ és a másik $l - \frac{1}{2}$, a két tag összegeződik és $B(M1)$ nagy lehet.

A ^{49}Sc esetén a szóban forgó két héj a $p_{3/2}$ és $f_{7/2}$, mindkettő $j = l + \frac{1}{2}$ pálya, tehát a_2 és β_1 ellentétes előjelű. A konkrét számítások az analóg-antianalóg átmenet $\sim 10^{-4}$ Weisskopf egységnyi erősségét reprodukálni tudták.

Hasonló a helyzet az $f_{7/2}$ héjban vizsgált egyéb tiltott analóg-antianalóg átmenetek esetében is.

A ^{59}Cu magban talált $g_{9/2}$ analóg rezonanciából származó ($g_{9/2} \rightarrow g_{9/2}$) $M1$ átmenet azonban meglepően erős: 1,5 Weisskopf egység. Az átmenet szempontjából fontos héjmodell pályák mindegyikére ($g_{9/2}$ és $p_{3/2}$) $j = l + \frac{1}{2}$, tehát Maripuu elméletének alapján tiltást várhatnánk, az $f_{7/2}$ héjba tartozó magoknál vizsgált analóg rezonanciák $M1$ átmeneteihez hasonlóan. Ezt a rendkívül erős $M1$ átmenetet megkísérelhetnénk magyarázni a target-mag igen alacsony T értékével ($T_0=1$) és az állapot $J=9/2$ spinjével, ugyanis az $M1$ átmeneti erősség kifejezéséből láthattuk (I. 17), hogy az T_0^2 -el fordítottan, a $J(J+1)$ értékkel pedig egyenesen arányos. Ezek a faktorok azonban a 3—4 nagyságrend különbséget nem tudják magyarázni, ami a tiltott $M1$ átmenetek erőssége és e között van.

Mérési eredményeink birtokában megkíséreljük rendszerezni az analóg-anti-analóg $M1$ átmenetekre vonatkozó eddigi ismereteinket.

A $^{31}\text{P}_{16}$ ($T_> = \frac{3}{2}$), $^{35}\text{Cl}_{18}$ ($T_> = \frac{3}{2}$) és $^{37}\text{Cl}_{20}$ ($T_> = \frac{5}{2}$) magokban az $f_{7/2}$ és $p_{3/2}$ analóg rezonanciák jelennek meg. Az analóg-antianalóg $M1$ átmenetek igen erősek, 1 Weisskopf egység nagyságrendjébe esnek. A rezonanciák γ bomlásainak elágazási arányai olyanok, hogy az átmenetek 80—90%-a vezet az antianalóg állapotra. Ezeknél a magoknál a magszerkezet olyan, hogy nincs lehetőség a nagyon bonyolult konfigurációk kialakulására, viszonylag kicsi a nívósűrűség, és sem a szülő, sem az analóg, sem az antianalóg állapotok nem hasadnak fel több nívóra. Részecske „transzfer” reakcióban, (d, p) vagy ($^3\text{He}, d$), ezek az állapotok nagy spektroszkópiai faktoral jelentkeznek.

A ^{39}K magban ellenben a $p_{3/2}$ analóg állapot $M1$ átmenetei gyengék, 0,1 Weisskopf egység nagyságrendűek. 23%, ill. 48%-os elágazási arányban vezetnek az antianalóg konfigurációnak megfelelő két nívóra. Itt már olyan maggal állunk szemben, amelyben az antianalóg állapot felhasadt több állapotra. Ezek közül részecske transzferben két nívó jelent meg, igen gyenge spektroszkópiai faktorokkal: $(2J+1)C^2S=0,05$ és 0,58. Az analóg rezonanciából erre a két nívóra vezet az $M1$ átmenet. Az ^{39}A -ben található szülő állapot spektroszkópiai faktora sem nagy ($S_n=0,52$), ami arra utal, hogy valószínűleg ez az állapot is több nívóra hasadt fel.

Az $f_{7/2}$ héjba tartozó $^{49}\text{Sc}_{28}$ ($T_> = 9/2$) magnál a $p_{3/2}$ analóg rezonancia analóg-antianalóg $M1$ átmenetéről már elmondtuk, hogy páratlanul gyenge ($6 \cdot 10^{-4}$ W. e.).

A γ átmeneteknek igen csekély része vezet a feltételezett antianalóg állapotra, ill. sok nívóra felhasadt antianalóg konfigurációnak arra a tagjára, amely (^3He , d) mérésekben viszonylag nagy ($S_p=0,68$) spektroszkópiai faktorról jelenik meg [66]. Ennél a magnál az a szerencsés helyzet valósul meg, hogy a szülő állapotból (^{49}Ca alapállapot) az antianalóg állapotra vezető β^- átmenetet is meg lehet figyelni [31]. Ha a β átmenet végállapota tisztán a feltételezett antianalóg konfiguráció, akkor az elméletileg várható $\log ft$ érték erre az átmenetre 3,5. A kísérletek elvégzése után $\log ft=4,9$ adódott, ami szintén azt bizonyítja, hogy ennél az állapotnál konfiguráció keveredés van. Az analóg állapot maga is több nívóra hasadt fel [67]. Csak a szülő-állapotra mondhatjuk, hogy az csaknem tiszta $p_{3/2}$ egyrészecske konfiguráció, felhasadás nélkül.

A $^{45}\text{Sc}_{24}$ ($T_g = \frac{5}{2}$) és $^{49}\text{V}_{26}$ ($T_g = \frac{5}{2}$) magokban szintén több komponensre felhasadt $p_{3/2}$ rezonanciákat találtunk. Az analóg rezonanciák $M1$ átmenetei az antianalóg állapotokra $\sim 10^{-2}$ Weisskopf egység erősségűek. Az átmenetek az antianalóg konfigurációnak gerjesztési energiában a legalacsonyabban fekvő nívójára mennek 10%–30% elágazási arányban. Ezeknél a magoknál már nemcsak az analóg és antianalóg állapotok, de a szülő állapotok is több nívóra hasadtak fel. A részecske transzfer reakciók is világosan bizonyítják ezt, a γ átmenetek tapasztalatai mellett.

Az $f_{7/2}$ héjban tehát sokkal bonyolultabbak az állapotok és a konfigurációk, mint az $s-d$ héjban. A megnövekedett nukleonszámoknak megfelelően komplikáltabb gerjesztések alakulnak ki, és a nagyobb nívósűrűség miatt a konfiguráció keveredés is egyre nagyobb szerephez jut. Ilyen körülmények között érthető, hogy tiszta egyrészecske gerjesztéseket és a nekik megfelelő erősen egyrészecske gerjesztés jellegű analóg állapotokat sem találjuk. A közbenső állapotokkal való keveredés eredményeképpen megjelennek a több komponensre felhasadt analóg rezonanciák és a sok nívóra szakadt antianalóg állapotok. Ilyenkor nem várhatjuk azt, hogy az analóg-antianalóg $M1$ átmenetek erősen, egyrészecske átmenetként jelenjenek meg.

Az $^{59}\text{Cu}_{30}$ ($T_g = 3/2$) magban talált $g_{9/2}$ analóg rezonancia egészen más természetű, mint az $f_{7/2}$ héjban talált rezonanciák. Az analóg-antianalóg átmenet erőssége 1,5 Weisskopf egység, határozottan egyrészecske jellegű [68]. Az antianalóg állapotra vezető $M1$ átmenet, 83%-a, a rezonancia teljes γ bomlásának. Ezekből az adatokból is azt következtetjük, hogy a szóban forgó állapotok egyrészecske gerjesztések. A részecske transzfer reakciók pedig ezt még jobban alátámasztják. A ^{59}Ni magban található szülő állapot $g_{9/2}$ nívó $S_n \sim 1$ spektroszkópiai faktorról. Sem az analóg rezonancia (28. ábra) sem az antianalóg $9/2^+$ állapot nem hasadt fel. Egy-egy nívó képviseli ezeket a konfigurációkat nagy spektroszkópiai faktorokkal.

Mindezek összefoglalásából azt kell megállapítanunk, hogy az analóg-antianalóg $M1$ átmenetek természetét elsősorban a magszerkezet határozza meg. Ez a döntő az átmenet erőssége és az elágazási arányok szempontjából is.

Ha a törzs polarizációjából származó állapotok nagy súllyal vannak jelen, keverednek az antianalóg konfigurációval, és az felhasadt több nívóra. Ez a felhasadás erősen csökkenti az $M1$ átmenet valószínűségét. Ha a (III. 2) összefüggést jobban szemügyre vesszük, láthatjuk, hogy a konkrét magszerkezet szerepének hangsúlyozása nem mond ellene Maripuu eredményének, hanem annak általánosabb alkalmazását teszi lehetővé. Az a_2 és β_1 együtthatók előjelének egyezése vagy ellentétessége csak akkor lehet döntő, ha azok nagyságrendje is összemérhető. Ha nincs törzs polarizáció vagy igen kismértékű, akkor β_1 is kicsi, a_2 mellett elhanyagolható és akár egyező, akár ellentétes előjelűek, β_1 nem befolyásolja az átmenet erősségét.

Az izobár analóg rezonanciák elektromágneses átmeneteinek tanulmányozása, amint azt az eddigi eredmények is mutatják, a magszerkezet kutatás fontos eszközévé vált. Várhatjuk, hogy az ilyen vizsgálatok kiterjesztése eddig nem vizsgált gerjesztési energia és tömegszám tartományokra további értékes információkkal járul hozzá eddigi magfizikai ismereteinkhez.

IV. Összefoglalás

Végezetül a dolgozatban részletesen tárgyalt eredményeket az alábbiakban összegezhetjük.

A KFKI 4 MeV-es Van de Graaff generátora által szolgáltatott proton nyalábbal létrehozott (p, γ) reakciókban gerjedő izobár analóg rezonanciákat tanulmányoztuk. A gamma sugárzást Ge(Li) detektorral detektáltuk. Vizsgáltuk a $^{44}\text{Ca}(p, \gamma)^{45}\text{Sc}$, $^{48}\text{Ti}(p, \gamma)^{49}\text{V}$ és $^{58}\text{Ni}(p, \gamma)^{59}\text{Cu}$ magreakciókban gerjeszthető $p_{3/2}$, ill. $g_{9/2}$ analóg rezonanciákat.

Kísérleti módszerünk a következő volt. Először felvettük a reakció gerjesztési görbét, hogy az analóg rezonanciákat azonosíthassuk. A gerjesztési görbét az általunk vizsgált tartományokban is ismerték már, de az analóg rezonanciák azonosítását mi végeztük el. Ezután megmértük az egyes analóg rezonanciák γ spektrumát. A γ spektrumok részletes analiziséből következtek a konkrét magok γ átmeneteire vonatkozó megállapításaink. A végállapotok spin, paritás értékei mások méréseiből ismertek. Saját eredményünk az elágazási arányok, ill. a Γ_γ abszolút értékek meghatározása, az egyes rezonanciákra vonatkozóan.

Ezen mérések alapján állapítottuk meg, hogy

1. Az $f_{7/2}$ héjba tartozó ^{45}Sc és ^{49}V magoknál, a $p_{3/2}$ analóg rezonancia több nívóra felhasadva jelenik meg, a bonyolult magszerkezetnek megfelelően. (Részecske transzfer reakciók alapján ismeretes, hogy ezekben a magokban a megfelelő antianalóg konfiguráció is több gerjesztett állapotra szétszóródva jelentkezik.)
2. A ^{45}Sc és ^{49}V magokban talált analóg rezonanciák γ bomlásában az analóg-antianalóg $M1$ átmenetekre vonatkozó elágazási arány $\sim 10\% - 30\%$, az $s-d$ héjbéli magokkal ellentétben, ahol ez lényegesen nagyobb érték.
3. Az analóg-antianalóg $M1$ átmenetek erőssége a ^{45}Sc és ^{49}V magokban $\sim 10^{-2}$ Weisskopf egység.
4. A $2p_{3/2}$ héjba tartozó ^{59}Cu magban a $g_{9/2}$ analóg rezonancia is igen erősen jelentkezett a vizsgált (p, γ) reakcióban felhasadás nélkül. (Ebben a tömegszám tartományban jelenleg ez az egyetlen ilyen nagy spin értékű analóg rezonancia, amit (p, γ) reakcióban megtaláltak.)
5. A ^{59}Cu -ban talált $g_{9/2}$ analóg rezonanciából származó analóg-antianalóg $M1$ átmenetre vonatkozó elágazási arány: 83% .
6. A kérdéses $M1$ átmenet erőssége $1,5$ Weisskopf egység, ami az átmenet egy-részecske jellegét támasztja alá. (Transzfer reakciók is azt mutatják, hogy sem az analóg, sem az antianalóg konfiguráció nincs felhasadva.)

Mindezek alapján összefoglalásul azt a következtetést kell levonnunk, hogy az analóg-antianalóg $M1$ átmenetek erőssége szempontjából minden esetben a konkrét magszerkezet játszik döntő szerepet. *S. Maripuu* elméleti számításai szerint a $2p_{3/2}$

hájban vizsgált analóg rezonanciánál is tiltott $M1$ átmenetet kell várnunk. A tiltást azonban a törzs polarizációjából származó állapotoknak az antianalóg konfigurációba való keveredése okozza, ami a ^{45}Sc és ^{49}V magoknál igen erős, de nem lép fel a ^{59}Cu mag $g_{9/2}$ analóg rezonanciájának esetében.

V. Köszönetnyilvánítás

Végezetül szeretnék köszönetet mondani munkatársaimnak, akikkel a méréseket végeztem: *Szentpétery Imrének, Szűcs Juditnak és Dr. Zimányi Józsefnek.*

Ezenkívül Dr. Keszthelyi Lajosnak, aki nemcsak a méréseknél volt segítségünkre, hanem a felmerülő problémák megvitatására is mindenkor készségesen vállalkozott, és a dolgotat megírására buzdított.

Köszönet illeti a Gyorsító Laboratórium kutatóit és technikus gárdáját sok fáradságos munkájukért, igyekezetükért, hogy a gyorsító a mérésekben fennakadás nélkül rendelkezésünkre álljon. Köszönettel tartozunk *Meszter Erika, Klopfer Erviné és Simon Tiborné* laboránsoknak a mérési adatok gyűjtésében nyújtott segítségükért.

Köszönetet szeretnék itt mondani *Dr. Bódi Tibornénak*, aki a gépelést végezte rendkívüli áldozatkészséggel és szorgalommal. Nem kevesebb köszönet jár *Meszter Erikának és Lipsicz Györgyinek* az ábrák elkészítéséért.

IRODALOMJEGYZÉK

1. J. D. Anderson, C. Wong, Phys. Rev. Lett. 7, 250, 1961.
2. J. D. Fox, C. F. Moore, D. Robson, Phys. Rev. Lett. 12, 198, 1967.
3. A. M. Lane, Phys. Rev. Lett. 8, 171, 1962. Nucl. Phys. 35, 676, 1962.
4. D. Robson, Phys. Rev. 137, B535, 1965.
5. C. Mahaux, Z. Phys. 196, 240, 1966. C. Mahaux, H. A. Weidenmüller, Nucl. Phys. A94, 1, 1967. C. Mahaux, H. A. Weidenmüller, Nucl. Phys. A97, 378, 1967.
6. C. Bloch, Lectures at Summer School at Villa Monastero, Varenna, 1965.
7. A. K. Kerman, A. F. R. De Toledo Piza, Ann. Phys. N. Y. 43, 3, 1968.
8. H. Feschbach, Ann. Phys. N. Y. 5, 357, 1958. Ann. Phys. N. Y. 19, 287, 1962. H. Feschbach, A. K. Kerman, R. H. Lemmer, Ann. Phys. N. Y. 41, 230, 1967.
9. G. A. Jones, A. M. Lane, G. Morrison, Phys. Lett. 11, 329, 1964.
10. E. Teranishi, B. Furubayashi, Phys. Lett. 20, 511, 1966.
11. Ilona Fodor, I. Demeter, L. Keszthelyi, I. Szentpétery, Z. Szökefalvi-Nagy, Judit Szűcs, L. Varga, J. Zimányi, Nucl. Phys. A116, 167, 1968.
12. G. B. Vingiani, G. Chilosi, W. Bruynesteyn, Phys. Lett. 26B 285, 1968.
13. S. Maripuu, Privát közlés.
14. V. F. Weisskopf, Phys. Rev. 83, 1073, 1951.
15. D. H. Wilkinson, Analysis of Gamma Decay Data, In Ajzenberg-Selove, Nuclear Spectroscopy B. Academic Press, New York and London, 1960.
16. E. K. Warburton, J. Weneser, in Isospin in Nuclear Physics, Edited by D. H. Wilkinson, North Holland Publishing Company, Amsterdam, 1969.
17. G. Morpurgo, Phys. Rev. 110, 721, 1958. Phys. Rev. 114, 1075, 1959.
18. S. J. Skorka, J. Hertel, T. W. Retz-Schmidt, Nuclear Data, Section A. 2, No 4. 347, 1966.
19. J. M. Soper, In Isospin in Nuclear Physics Edited by D. H. Wilkinson, North Holland Publishing Company. Amsterdam, 1969.
20. W. M. Mac Donald, Phys. Rev. 110, 1420, 1958.
21. W. M. Mac Donald, Phys. Rev. 100, 51, 1955. Phys. Rev. 101, 271, 1956.
22. A. M. Lane, J. M. Soper, Nucl. Phys. 37, 663, 1962.
23. A. M. Lane, J. M. Soper, Phys. Lett. 1, 28, 1962.

24. L. A. Sliv, Yu. I. Kharitonov, Phys. Lett. 16, 176, 1965.
25. C. Mahaux, H. A. Weidenmüller, Shell Model Approach to Nuclear Reactions North Holland Publishing Company, Amsterdam, 1969.
26. R. Bansal, Phys. Rev. 153, 1084, 1967.
27. S. Maripuu, Nuclear Physics. A123, 357, 1968.
28. G. Vorpoulos, R. Shoup, J. D. Fox, J. B. Ball, In Nuclear Isospin, Edited by J. D. Anderson, S. D. Bloom, J. Cerny, W. W. True, Academic Press New York and London, 1969.
29. Nuclear Data B. Vol. 2. No 5. 1966.
30. S. D. Bloom, In Isobaric Spin in Nuclear Physics. Edited by J. D. Fox and D. Robson. Academic Press New York and London 1966,
31. L. G. Mann, S. D. Bloom, Nucl. Phys. A140, 598, 1970.
32. S. S. Hanna, In Isospin in Nuclear Physics, Edited by D. H. Wilkinson, North Holland Publishing Company. Amsterdam, 1969.
33. P. M. Endt, Nuclear Structure, North Holland Publishing Company, Amsterdam, 1967.
35. S. Maripuu, Nucl. Phys. A151, 465, 1970.
36. P. M. Endt, In Nuclear Isospin Edited by J. D. Anderson, S. D. Bloom, J. Cerny, W. W. True. Academic Press New York and London, 1969.
37. S. Maripuu, Phys. Lett. 31B, 181, 1970.
38. I. Talmi, I. Unna, Ann. Rev. of Nucl. Sci. 10, 382, 1960.
39. J. B. French, Nucl. Phys. 26, 161, 1961.
40. M. M. Macfarlane, In Nuclear Isospin Edited by J. D. Anderson, S. D. Bloom, J. Cerny, W. W. True, Academic Press, New York and London, 1969.
41. M. Hasinoff et al. In ref. 32.
42. H. Ejiri, J. P. Bondorf, Phys. Lett. 29B, 111, 1969.
43. P. M. Endt and C. Van der Leun, Energy Levels of $Z = 11 - 21$ Nuclei, Nucl. Phys. A105, 1, 1967.
44. R. O. Bondelid, J. N. Butler, Phys. Rev. 130, 1078, 1963.
45. N. F. Mott, In Handbuch der Physik. XLV. Springer Verlag, 1958.
46. R. C. Greenwood, J. H. Reed, Prompt Gamma Rays from Radiative Capture of Thermal Neutron. USAEC-report IITRI-1193-53. Vol. 1-2, 1965.
47. J. Rappaport, W. E. Dorenbusch, T. A. Belote, Phys. Rev. 156, 1255, 1967.
48. J. D. Anderson, C. Wong, L. W. McClure, Phys. Rev. 138. B615, 1965.
49. B. Erlandson, K. Valli, Arkiv f. Physik 25, 143, 1964.
50. C. Gaarde, K. Kemp, T. Nielsen, Nucl. Phys. A118, 641, 1968.
51. A. E. Blaugrund, R. E. Holland, F. J. Lynch, Phys. Rev. 159, 926, 1967.
52. J. J. Schwarz, W. P. Alford, Phys. Rev. 149, 820, 1966.
53. J. Dubois, Nucl. Phys. 23, 537, 1961.
54. H. V. Klapdor, Nucl. Phys. A114, 673, 1968.
55. I. Demeter, Ilona Fodor, L. Keszthelyi, I. Szentpétery, Judit Szűcs, Z. Szőkefalvi-Nagy, L. Varga, J. Zimányi, Acta Physica. 30, 1, 1971.
56. D. J. Pullen, B. Rosner, O. Hansen, Phys. Rev. 166, 1142, 1968.
57. D. Bachner, R. Santo, H. H. Duhm, R. Bock, S. Hinds, Nucl. Phys. A106, 577, 1968.
58. J. C. Legg, D. G. Megli, D. R. Abraham, L. D. Ellsworth, S. Hecht, Phys. Rev. 186, 1138, 1969.
59. P. D. Barnes, J. R. Comfort, C. K. Bockelman, O. Hansen, A- Sperduto, Phys. Rev. 159, 920, 1967.
60. R. H. Fulmer, A. L. McCarthy, B. L. Cohen, Phys. Rev. 133, B955. 1964.
61. D. J. Pullen, B. Rosner, Phys. Rev. 170, 1034, 1968.
62. G. A. Bartholomew, M. R. Gunye, Bull. Ann. Phys. Soc. 8, 367, 1963.
63. J. W. Butler, C. R. Gossett, Phys. Rev. 108, 1473, 1957.
64. Nuclear Data Tables, B. Vol. 2. No 5. 1968.
65. J. H. Carver, G. A. Jones, Nucl. Phys. 19, 184, 1960.
66. J. R. Erskine, A. Marinov, J. P. Schiffer, Phys. Rev. 142, 633, 1966.
67. P. Wilhjelmsen et. al. Phys. Rev. 177, 1553, 1969.
68. Ilona Fodor, I. Szentpétery, Judit Szűcs, Phys. Lett. 32B, No 8. 689, 1970.
69. Ilona Fodor, Phys. Lett. 31B, 336. 1970.

AZ ANHARMONIKUS KRISTÁLYOK SELF-CONSISTENS ELMÉLETE I*.

SIKLÓS TIVADAR

Egyesített Atomkutató Intézet, Elméleti Fizikai Laboratórium, Dubna
MTA Központi Fizikai Kutató Intézet, Budapest

1. Bevezetés

A modern elméleti szilárdtest-fizika *Debye* [1], *Born* és *Kármán* [2] munkái alapján a kristályrács rezgéseinek tanulmányozásából sarjadt ki.

A kristályrács atomjai egyensúlyi helyzetük körül rezgéseket végeznek minden hőmérsékleten: a $T=0^\circ\text{K}$ hőmérsékleten a kvantummechanikai nullponti rezgések következtében, a $T>0^\circ\text{K}$ hőmérséklet esetében pedig a hőmozgás eredményeképpen. A kristályrács atomjainak rezgései és a kristály dinamikai, termodinamikai és rugalmas tulajdonságait jellemző mennyiségek között kapcsolat áll fenn, a rácsrezgések tanulmányozásának egyik fontos célkitűzése éppen az, hogy megadja a kristály makroszkopikus tulajdonságainak mikroszkopikus magyarázatát. A kristályrács rezgéseinek spektrumát és annak felhasználásával a kristály makroszkopikus tulajdonságait jellemző mennyiségeket kiszámíthatjuk, ha ismerjük a kristályrács atomjai közötti kölcsönhatás potenciálját. Adiabaticus közelítésben [3], [4], [5] a kristály potenciális energiáját mint az atomok pillanatnyi helykoordinátáinak függvényét írhatjuk fel. Ha feltételezzük, hogy a rácsrezgések amplitúdói kicsinyek a rács atomjainak egyensúlyi távolságához viszonyítva, akkor a kristály potenciális energiáját sorba fejthetjük e kis rezgési amplitúdók hatványai szerint. A legegyszerűbb közelítés a harmonikus közelítés, amikor a sorfejtésben a négyzetes tagnál megállunk és a rezgési amplitúdók magasabb hatványkitevőjű tagjait elhanyagoljuk. A kristályok elmélete harmonikus közelítésben részletesen kidolgozott, kialakult elmélet [5], [6], [7], amely a kölcsönhatás nélküli normálrezgések — a fononok — fogalmának a felhasználásával nagyjából helyesen írja le a kristály tulajdonságait. A kísérleti adatok és a harmonikus közelítésben nyert elméleti eredmények kvalitatíve és a nagyságrendeket illetően általában elég jó egyezést mutatnak, azonban a harmonikus közelítés több vonatkozásban nem bizonyult kielégítőnek a kristály tulajdonságainak a kvantitatív leírására [8].

Az elmélet továbbfejlesztésének kézenfekvő első lépése az, hogy a harmonikus közelítés, mint kiinduló közelítés alapján a perturbációszámítás szokásos módszereivel mint perturbáló tagokat vesszük figyelembe a potenciális energia sorfejtésének harmad- és negyedfokú anharmonikus tagjait. Ez a perturbációs közelítés általában elég jól bevált, és számos, a kristály tulajdonságait elméleti úton tanulmányozó dolgozatban alkalmazták. A kísérleti adatok és az elméleti eredmények összhangja tovább javult, a kristály tulajdonságainak egy jobb, pontosabb leírását szolgáltatva ez a közelítés. Az elért eredményeket több jó összefoglaló munkában [8]—[11] ismertették, ezért itt nem foglalkozunk velük részletesebben. Megjegyezzük, hogy a tapasztalatok szerint a statisztikus mechanika Green-függvényes módszere [12]—[18]

* Doktori értekezés. Érkezett 1972. ápr. 20.

** Az irodalmi hivatkozásokat I. a II. rész végén.

a kristályok egyensúlyi [19]—[33] és transzport [34]—[42] tulajdonságai vizsgálatának egyaránt igen jó és effektív módszere, a perturbációs közelítés kereteiben.

Jóllehet a perturbációs közelítés a kristályok tulajdonságainak meglehetősen jó leírását adja, mégis vannak olyan esetek, amikor ez a közelítés nem alkalmazható. Jó példa erre az utóbbi évek folyamán igen sokoldalúan tanulmányozott [43] He^3 és He^4 kristályok, az úgynevezett kvantumkristályok esete. A gyengén kötött és kis tömegű He-atomokból felépített hélium-kristályban az atomok nullponti rezgéseinek amplitúdója szokatlanul nagy: az atomok közötti egyensúlyi távolság $\sim 30\%$ -át is eléri. Már maga ez a tény is kérdésessé teszi a potenciális energia sorfejtésének jogosultságát és a perturbációs számítás alkalmazhatóságát. A kvantumkristályok esetében azonban egy alapvető nehézség is jelentkezik. *De Wette* és *Nijboer* megmutatták [44], hogy héliumkristályok esetében kváziharmonikus közelítésben nem léteznek a normálrezgések, a fononok. Ebben a közelítésben ugyanis a hélium atomok rezgési frekvenciái tisztán képzeteseknek adódnak, ami a kristályállapot instabilitását jelenti [5]. Így a kvantumkristályok esetében a perturbációs számítás eleve nem alkalmazható, hiszen maga a kiindulási közelítés nem létezik.

Egy amerikai-kanadai kutatócsoport részletesen megvizsgálta a perturbációs közelítés alkalmazhatóságát a nemesgáz-kristályok: az argon, a kripton és a xenon kristályok esetében [45], [46]. Az idézett dolgozatokban a potenciális energia sorfejtésének harmad- és negyedfokú anharmonikus tagjait vették figyelembe és a közvetlenül szomszédos atomok kölcsönhatását a Mie—Lennard—Jones potenciál

$$\varphi(R) = \frac{6m\epsilon}{m-6} \left[\frac{1}{m} \left(\frac{\sigma}{R} \right)^m - \frac{1}{6} \left(\frac{\sigma}{R} \right)^6 \right] \quad (1.1.1)$$

felhasználásával írták le, ahol ϵ a potenciálgödör mélységét jelöli, és az m paraméter értékét $m=12$ és $m=13$ választották meg. Az idézett dolgozatok szerzői kiszámították az Ar, Kr és Xe kristályok termodinamikai tulajdonságait jellemző mennyiségeket a perturbációs számítás szokásos módszereivel, és a számítások eredményeit összehasonlították a megfelelő kísérleti adatokkal. Az összehasonlítás arra a meglepő eredményre vezetett, hogy az elmélet már akkor az érvényét veszti, amikor az egyensúlyi helyzetből való elmozdulás négyzetes középértékéből vont négyzetgyök nagyobb, mint az atomok egyensúlyi távolságának mintegy 6% -a. Ez az állítás egyenértékű azzal az állítással, hogy a vizsgált elmélet elveszti az érvényességét, ha a hőmérséklet a T_m olvadási hőmérsékletnek körülbelül a harmadrészét eléri. Míg ugyanis a $T \lesssim \frac{1}{3}T_m$ hőmérsékleti tartományban a számított termodinamikai mennyiségek mind nagyságrendjüket, mind hőmérséklet függésüket illetően elég jó megegyezést mutatnak a kísérleti adatokkal, ez az egyezés megszűnik, az elméleti eredmények és a kísérleti adatok között nagy eltérés lép fel, ha $T > \frac{1}{3}T_m$. A [45] és [46] dolgozatoknak a fentebb röviden összefoglalt eredményei megmutatták tehát, hogy magasabb hőmérsékletek esetében, amikor $T > (0,3-0,5)T_m$, az anharmonicitás immár lényeges szerepet játszik a kristályokban, és a harmonikus normálrezgéseket, a harmonikus fononokat nem tekinthetjük a rendszer jól definiált elemi gerjesztéseinek.

Célszerűnek látszik az angol nyelvű irodalomban már kialakult szokásnak megfelelően bevezetni az „anharmonikus kristály” elnevezést. Az anharmonikus kristály elnevezést fogjuk használni minden olyan esetben, amikor röviden ki akarjuk fejezni, hogy a kristály tulajdonságainak kialakításában az anharmonicitásból eredő effektusok lényeges szerepet játszanak, és a harmonikus közelítés nem tekint-

hető alkalmas kiindulási közelítésnek a kristály tulajdonságainak a leírására. Ebben az értelemben anharmonikus kristályok a kvantumkristályok. A fentieknek megfelelően ugyancsak anharmonikus kristályoknak kell neveznünk a klasszikus kristályokat is, amikor elég magas hőmérsékleten: $T > (0,3 - 0,5)T_m$ kívánjuk vizsgálni tulajdonságaikat.

A továbbiakban az anharmonikus kristályok elméletével fogunk foglalkozni.

A kristályok dinamikai és termodinamikai tulajdonságait alapjaiban jól leíró Born—Kármán elmélet tehát az anharmonikus kristályok esetében nem kielégítő. Mint láttuk ez az elmélet nyilvánvaló ellentmondásra vezet a kvantumkristályok esetében, a klasszikus kristályok vonatkozásában pedig a $T > (0,3 - 0,5)T_m$ hőmérsékleti tartományban nincs meg a szükséges összhang a kísérleti adatok és az elméleti eredmények között. Elemezzük a Born—Kármán elméletet szemléletesen és gondoljuk meg, milyen vonatkozásban kell ezt az alapjaiban helyes elméletet módosítani, hogy alkalmas legyen az anharmonikus kristályok tárgyalására. A Born—Kármán elmélet abból az alapfeltevésből indul ki, hogy a kristályrács atomjai egyensúlyi helyzetük körül kis amplitúdóval rezgőmozgást végeznek a többi atom által létrehozott potenciáltérben. Tekintettel a rezgések kis amplitúdójára, a potenciáltér egy átlagos potenciállal írhatjuk le, az átlagos potenciál kiszámításánál az atomokat gyakorlatilag nyugalomban levőknek tételezhetjük fel. A potenciált, amelyet egy szomszédos atom alakít ki egy adott atom vonatkozásában, egy rövid hatótávolságú erős taszítópotenciálból és egy hosszú hatótávolságú gyengébb vonzópotenciálból felépítettnek tekinthetjük, és a kristályrács minden egyes atomja az összes többi atom által létrehozott, a fenti típusú potenciálok összességéből kialakult átlagos potenciáltérrel érzékeli. Amíg a rácsrezgések amplitúdója az atomok közötti egyensúlyi távolsághoz viszonyítva kicsiny, a rács többi atomja által létrehozott potenciált egy jól definiált potenciálgödörnek foghatjuk fel, a rezgő atom egyensúlyi helyzete a potenciális energia minimuma helyének felel meg, és a rezgő atom a potenciálgödörnek gyakorlatilag csak a valóban harmonikus jellegű alját érzékeli. Ebben az esetben valóban be lehet vezetni a rendszer jól definiált elemi gerjesztéseit, a fononokat, amelyek a kristályrács normálrezgései, és amelyeknek az anharmonicitásból eredő kölcsönhatása kicsi. Amikor azonban a kristályrács atomjainak a rezgési amplitúdója növekszik, akkor egyrészt a rezgő atomok a többi atom által létrehozott átlagos potenciálnak már nemcsak azt a közelítőleg valóban harmonikus részét érzékelik, amely az egyensúlyi távolságnak megfelelő hely körül alakul ki, hanem az attól távolabbi, egyre erősebben anharmonikus jellegű részeit is. Másrészt ekkor a potenciál kiszámításánál már nem hanyagolhatjuk el a kristályrács atomjainak a rezgőmozgását, vagyis figyelembe kell vennünk, hogy a kiszemelt atom az egyensúlyi helyzetük körül rezgéseket végző atomok átlagos potenciáltérét érzékeli. Ez a szemléletes kép egyértelműen arra figyelmeztet, hogy ekkor a fononokat már nem tekintjük kölcsönhatás nélkülieknek, a normálrezgések kölcsönhatását figyelembe kell venni. Ez a szemléletes kép jól érzékelteti egyben azt is, hogy a feladat self-consistens tárgyalásmódot igényel. A fentiek mellett a magas hőmérsékletek esetében egy másik megfontolás is ugyanerre a következtetésre vezet. Amíg ugyanis a rácsrezgések amplitúdója kicsiny, a fononok száma ugyancsak kicsiny, hiszen mint ismeretes $u^2 \sim 2n_{kj} + 1$, ahol u^2 az egyensúlyi helyzetből való eltérés négyzetes középértéke és n_{kj} a fononok átlagos száma, és így a fononok kölcsönhatását elhanyagolhatjuk. Amikor azonban a rácsrezgések amplitúdója nagy, a fononok száma is nagy, és ezért a fononok kölcsönhatását figyelembe kell venni. Mint ismeretes [14],

[15], a soktest-probléma elméletében a self-consistens tér közelítés az első lépés a kölcsönhatás figyelembevételére. Vagyis újra arra a következtetésre jutottunk, hogy a rácsrezgéseket self-consistens módon kell tárgyalni az anharmonikus kristályok esetében.

Az anharmonikus kristályok elmélete self-consistens felépítésének gondolata *Borntól* [4] származik, aki a rácsrezgések frekvenciájának és az atomok egyensúlyi helyzetének meghatározására egy self-consistens egyenletrendszert vezetett le az alacsonyabb rendű anharmonikus tagokat figyelembe véve. *Born*nak ez a gondolata az alapja az anharmonikus kristályok ellentmondásmentes, a kvantumkristályok esetében eleve imaginárius frekvenciákra nem vezető self-consistens elméletének. A self-consistens tárgyalásmódot tudomásunk szerint először *Hooton* [47] alkalmazta és fejlesztette ki az anharmonikus kristályok tulajdonságainak a vizsgálatára a $T=0^\circ\text{K}$ hőmérsékleten.

A kristály self-consistens elméletét két, egymástól különböző tárgyalásmód alapján lehet felépíteni, az egyik az egyrészcseke-képből, a másik a kollektív képből indul ki.

Az egyrészcseke-képen alapuló tárgyalás keretében a kristályrácsot alkotó atomok individuális mozgását vizsgálják egy potenciáltérben. Az atomok Schrödinger-egyenletének megoldása előállítja az atom energia-sajátértékeit és sajátfüggvényeit. Feltételezik, hogy a kristályt alkotó atomok mindegyikének azonos energiaspektruma van. A kristály létezésének e képből az a feltétele, hogy a legalacsonyabb betöltött sajátállapot kötött állapot legyen. A kristályt alkotó atomok által létrehozott, a kiválasztott atomra ható potenciált egy átlagos potenciállal írják le. Ezt az átlagos potenciált úgy számítják ki, hogy a különböző sajátállapotok eloszlási valószínűsége szerint egy Boltzmann-féle hőmérsékleti súlyfaktorral átlagolják az atomok közötti kölcsönhatás potenciálját. Ez a közelítés ugyanaz, mint a többtest-probléma tárgyalásánál gyakran használt időtől függő Hartree-féle self-consistens tér közelítés. Ebben a képből a fononok mint a kristály külső hatásra való reakciójának normálrezgései jelennek meg. Más szóval, ennek a képből a keretében a kollektív gerjesztéseket, a fononokat, a Hartree-féle self-consistens tér közelítésben meghatározott egyrészcseke-gerjesztésekből építik fel. Az egyrészcseke-képet többen is alkalmazták a kristály tulajdonságainak vizsgálatára [48]–[55].

A kollektív képen alapuló tárgyalás keretében eleve feltételezzük, hogy a kristály elemi gerjesztései a kollektív rezgéshullámok, a fononok. Ezt a feltételezést a kísérlet alátámasztja a kvantumkristályok esetében is: a hanghullámok a He-kristályokban is jól terjednek, tehát a kristály jól definiált normálrezgéseinek tekintethetők. A kollektív képen alapuló tárgyalás esetében tehát a fononokat eleve bevezetjük, a feladat a fononok frekvenciájának, csillapodásának meghatározása és ezeknek a mennyiségeknek a segítségével a kristály tulajdonságainak leírása. E kép keretében az egyes atomok mozgását a fononállapotok betöltésével jellemezzük.

Az egyrészcseke-képen alapuló és a kollektív képen alapuló tárgyalásmód összehasonlítását és rövid áttekintését az [56] összefoglaló dolgozatban találhatjuk meg. Megjegyezzük, hogy mind a két tárgyalásmód részben tükrözi a reális fizikai képet, a valóság valahol e két, bizonyos értelemben szélsőségesen megfogalmazott kép között van. Mindkét tárgyalásmódnak egyaránt vannak előnyei és hátrányai. A kollektív kép keretében egyszerűbben vizsgálhatók a rácsrezgések korrelációi. Az egyrészcseke-kép keretében könnyebben vizsgálhatók a szilárd testek egyrészcseke-effektusai, mint például a vakanciák keletkezése, a szennyező atomok hatása, a rács-

pontok közötti kicserélődési folyamatok stb., azonban az elmélet felépítése véleményünk szerint e kép alapján bonyolultabb, mint a kollektív kép alkalmazása esetén. Dolgozatunkban a kollektív kép alapján fogjuk tárgyalni a kristályok self-consistens elméletét, ezért az egyrészezske-kép részletesebb tárgyalásával nem foglalkozunk.

A self-consistens fononok bevezetésén alapuló tárgyalásmódot a legutóbbi évek során gyakorlatilag egyidejűleg és egymástól függetlenül többen is újra felfedezték, és különböző számítási technikát használva az anharmonikus kristályoknak a kollektív képen alapuló self-consistens elméletét több ekvivalens változatban is kidolgozták [56]–[91]. Napjainkban az anharmonikus kristályok self-consistens elmélete három ekvivalens megfogalmazásban ismeretes. Az elmélet mindhárom változata a kollektív képből indul ki, vagyis feltételezi, hogy a kristály alacsonyán fekvő gerjesztett állapotainak spektrumát jól közelíti a self-consistens fononok spektruma. Ezt más szavakkal úgy is megfogalmazhatjuk, hogy a self-consistens fononokat a kristály jól definiált elemi gerjesztéseinek tekintjük.

Tekintsük át a self-consistens elmélet e három változatát.

A dolgozatok egyik csoportjában [56]–[65] a variációs elvet használják fel az anharmonikus kristály self-consistens elméletének felépítésére. Az elmélet e változatát legelegánsabban *Werthamer* [56], [65] fogalmazta meg. A self-consistens elméletnek a variációs elv felhasználásán alapuló változatát [56] és [64] alapján foglalkozunk össze.

Minthogy a kollektív kép alapfeltevése szerint a fononok spektruma a kristály alacsonyán fekvő gerjesztett állapotainak a spektrumát jól közelíti, *Werthamer* egy olyan próbarendszerből indul ki, amelynek alacsonyán fekvő gerjesztett állapotai jól definiált próbafononok. A próbarendszer variációs paramétereket tartalmaz, amelyeket a továbbiakban úgy határoz meg, hogy a próbarendszer alacsonyán fekvő gerjesztéseinek spektruma a lehető legjobban közelítse a kristály megfelelő gerjesztési spektrumát. E célból a rendszer szabadenergiáját minimalizálja a variációs paraméterek szerint, és a minimum feltételéből határozza meg a variációs paraméterek értékét.

Ha feltételezzük, hogy a próbafononok élettartama végtelen, vagyis ha a fononok csillapodását elhanyagolhatónak tekintjük, akkor a feladat egy harmonikus próba Hamilton-operátor bevezetésével tárgyalható [64]. Írjuk fel a kristály Hamilton-operátort

$$\begin{aligned}
 H &= \sum_l \frac{\vec{P}_l^2}{2M} + U(\vec{R}_1, \dots, \vec{R}_N) = \\
 &= \sum_l \frac{\vec{P}_l^2}{2M} + \frac{1}{2} \sum_{l,m} \vec{\Phi}_{lm}^{\alpha\beta} u_l^\alpha u_m^\beta + \{U(\vec{R}_1, \dots, \vec{R}_N) - \frac{1}{2} \sum_{l,m} \vec{\Phi}_{lm}^{\alpha\beta} u_l^\alpha u_m^\beta\} = H_0 + \{H - H_0\}
 \end{aligned} \quad (1.1.2)$$

alakban, ahol \vec{P}_l és \vec{R}_l az l -edik rácsponthoz tartozó M tömegű atom pillanatnyi impulzus-, illetve helyzetvektor-operátora, $U(\vec{R}_1, \dots, \vec{R}_N)$ a kristály potenciális energiája adiabatikus közelítésben. Bevezettük továbbá az l egyensúlyi helyzetből való elmozdulás \vec{u}_l operátorait az

$$\vec{R}_l^\alpha = \langle \vec{R}_l^\alpha \rangle + u_l^\alpha \equiv \vec{r}_\alpha + u_l^\alpha \quad (1.1.3)$$

definícióval, ahol a $\langle \dots \rangle$ szimbólum a statisztikai középértékképzést jelöli. Valamilyen

A mennyiségnek a \mathcal{H} Hamilton-operátorral leírt rendszer egyensúlyi állapotaira vett statisztikai középértékén az

$$\langle A \rangle = Sp(\varrho A) = Sp(e^{-\frac{\mathcal{H}}{\theta}} A) / Sp(e^{-\frac{\mathcal{H}}{\theta}}) \quad (\theta = k_B T) \quad (1.1.4)$$

képlet felhasználásával számított mennyiséget értjük, ahol ϱ az egyensúlyi sűrűség-operátor. A H_0 harmonikus próba Hamilton-operátor kifejezésében szereplő $\Phi_{lm}^{z\beta}$ mennyiségek variációs paraméterek, amelyeket a továbbiakban a Bogoljubov-féle variációs elv felhasználásával fogunk meghatározni.

A szabadenergia próba-kifejezését ekkor

$$\begin{aligned} F_{\text{próba}} &= F_0 + \langle H - H_0 \rangle_0 = \\ &= F_0 + \langle U(\vec{R}_1, \dots, \vec{R}_N) \rangle_0 - \frac{1}{2} \sum_{\substack{l, m \\ \alpha \beta}} \Phi_{lm}^{z\beta} \langle u_l^\alpha u_m^\beta \rangle_0 \end{aligned} \quad (1.1.5)$$

alakban írhatjuk fel, ahol F_0 a H_0 harmonikus Hamilton-operátornak megfelelő harmonikus szabadenergia:

$$F_0 = -\theta \ln Sp e^{-\frac{H_0}{\theta}} \quad (1.1.6)$$

és $\langle u_l^\alpha u_m^\beta \rangle_0$ az elmozdulás-operátoroknak a H_0 Hamilton-operátorral kiszámított korrelációs függvénye.

Fejtsük sorba a kristály potenciális energiáját az egyensúlyi helyzetből való elmozdulás hatványai szerint és képezzük a H_0 Hamilton-operátorral számított középértékét:

$$\begin{aligned} \tilde{U} &= \langle U(\vec{R}_1, \dots, \vec{R}_N) \rangle_0 = \\ &= \langle \exp \sum_{l, \alpha} u_l^\alpha \nabla_l^\alpha \rangle_0 U_0(\vec{l}_1, \dots, \vec{l}_N) = \\ &= \exp \left\{ \frac{1}{2} \sum_{\substack{l, m \\ \alpha \beta}} \langle u_l^\alpha u_m^\beta \rangle_0 \nabla_l^\alpha \nabla_m^\beta \right\} U_0(\vec{l}_1, \dots, \vec{l}_N). \end{aligned} \quad (1.1.7)$$

Az (1.1.5) és (1.1.7) kifejezések alapján láthatjuk, hogy a szabadenergia próbakifejezése a $\Phi_{lm}^{z\beta}$ és $\langle u_l^\alpha u_m^\beta \rangle_0$ mennyiségeknek a funkcionálja, amelyek szerint külön-külön variálhatjuk a szabadenergia kifejezését és ekkor a

$$0 = \frac{\delta F_{\text{próba}}}{\delta \Phi_{lm}^{z\beta}} = \frac{\delta F_0}{\delta \Phi_{lm}^{z\beta}} - \frac{1}{2} \langle u_l^\alpha u_m^\beta \rangle_0. \quad (1.1.8)$$

$$0 = \frac{\delta F_{\text{próba}}}{\delta \langle u_l^\alpha u_m^\beta \rangle_0} = \frac{1}{2} \nabla_l^\alpha \nabla_m^\beta \langle U(\vec{R}_1, \dots, \vec{R}_N) \rangle_0 - \frac{1}{2} \Phi_{lm}^{z\beta} \quad (1.1.9)$$

variációs egyenletrendszert nyerjük. Az (1.1.8) egyenlet összefüggést állapít meg a két variációs változó között, az (1.1.9) egyenlet pedig megmutatja, hogy a $\Phi_{lm}^{z\beta}$ variációs paraméter optimális értékét a potenciális energia második deriváltjának statisztikus középértéke adja meg.

Ekkor a próbafononok ω_{kj} frekvenciáját és \tilde{e}_{kj} polarizációs vektorait az

$$e_{kj}^z \omega_{kj}^2 = \frac{1}{MN} \sum_{l,m,\beta} e^{-i\vec{k}(\vec{l}-\vec{m})} \nabla_l^z \nabla_m^\beta \tilde{U} e_{kj}^\beta \quad (1.1.10)$$

sajátértékegyenlet határozza meg, ahol a \vec{k} vektor jelöli a fonon kváziimpulzusát, a j egész számú index pedig megadja, hogy a szóban forgó fonon az energiaspektrum melyik ágához tartozik. A (1.1.10) sajátértékegyenletből láthatjuk, hogy a fononok spektrumát a kristály potenciális energiájának statisztikus középértéke segítségével írhatjuk fel, amely viszont az elmozdulás-operátorok korrelációs függvényeivel fejezhető ki (1.1.7) szerint. A bevezetett próbafononokat tehát a fentiek alapján self-consistens fononoknak nevezhetjük.

A harmonikus szabadenergia (1.1.6) kifejezését ekkor felírhatjuk

$$F_0 = \theta \sum_{k,j} \ln 2 \sinh(\omega_{kj}/2\theta) \quad (1.1.11)$$

alakban és az egyensúlyi helyzetből való elmozdulás-operátorok korrelációs függvényeire pedig (1.1.8) felhasználásával az

$$\langle u_l^\alpha u_m^\beta \rangle_0 = \frac{1}{MN} \sum_{kj} \frac{e_{kj}^\alpha e_{kj}^\beta}{2\omega_{kj}} e^{-i\vec{k}(\vec{l}-\vec{m})} \coth\left(\frac{\omega_{kj}}{2\theta}\right) \quad (1.1.12)$$

kifejezést nyerjük. Végeredményben tehát a self-consistens fononok ω_{kj} frekvenciáját és \tilde{e}_{kj} polarizációs vektorait a (1.1.7), (1.1.10) és (1.1.12) egyenletekből álló self-consistens egyenletrendszer határozza meg. A fenti egyenletrendszert ki kell még egészíteni a kristály állapotegyenletével, amely összefüggést állapít meg a kristályrács atomjainak egyensúlyi helyzetvektorai és a kristályra ható külső erők között. Az állapotegyenletet az egyensúlyi állapot feltételéből vezethetjük le, és P izotróp külső nyomás hatása esetében

$$PV = -\frac{1}{3} \sum_{l,\alpha} I_\alpha \nabla_l^\alpha \tilde{U} \quad (1.1.13)$$

alakban írhatjuk fel, ahol V a kristály térfogata. A fentiek alapján kiszámíthatjuk továbbá a rendszer F_{\min} minimális szabadenergiáját és E belső energiáját, amely mennyiségekre az

$$F_{\min} = F_0 - \frac{1}{4} \sum_{kj} \omega_{kj} \coth\left(\frac{\omega_{kj}}{2\theta}\right) + \tilde{U} \quad (1.1.14)$$

és

$$E = \langle H \rangle_0 = \frac{1}{4} \sum_{kj} \omega_{kj} \coth\left(\frac{\omega_{kj}}{2\theta}\right) + \tilde{U} \quad (1.1.15)$$

kifejezéseket nyerjük. A (1.1.7), (1.1.10)–(1.1.15) képletek és a jól ismert termodinamikai összefüggések felhasználásával ki lehet számítani a kristály dinamikai, termodinamikai és rugalmas tulajdonságait jellemző mennyiségeket a vizsgált közelítésben, ha adott a kristályrács atomjai közötti kölcsönhatás $U_0(\vec{l}_1, \dots, \vec{l}_N)$ potenciálja. A fent tárgyalt közelítést „self-consistens fonon” közelítésnek nevezték el.

Bonyolultabb eljárást kell alkalmazni, ha a próbafononokat véges élettartamú-
aknak tekintjük. Werthamer [56], [65] ennek az esetnek a vizsgálatára a szokásos
módon [15], [16] egy próba-hatásoperátort vezet be

$$S = \sum_l \int_0^{-i/\theta} dt \left[\frac{\vec{P}_l^2(t)}{2M} - \vec{F}_l(t) \vec{u}_l(t) \right] + \\ + \frac{1}{2} \sum_{l,m}' \int_0^{-i/\theta} dt_1 \int_0^{-i/\theta} dt_2 \frac{1}{2} T_D \{ [\vec{u}_l(t_1) - \vec{u}_m(t_1)] \Phi_{lm}(t_1 - t_2) [\vec{u}_l(t_2) - \vec{u}_m(t_2)] \} \quad (1.1.16)$$

alakban, ahol T_D a Dyson-féle kronologikus rendezés operátora, \vec{F}_l a kristályra
ható külső deformáló erő, a $\Phi_{lm}(t_1 - t_2)$ mennyiség variációs paraméter. A t idő-
változó szerint integrálást az imaginárius idő-hőmérséklet tengely mentén kell
elvégezni.

A kristály szabadenergiáját ekkor

$$F = -\theta \ln Sp e^{-\frac{H}{\theta}} = -\theta \ln Sp e^{-iS - \left(\frac{H}{\theta} - iS\right)} = \\ = -\theta \ln Sp e^{-iS} - \theta \ln \langle T_D \{ \exp \left[-i \int_0^{-i/\theta} dt \tilde{V}(t) \right] \} \rangle_S \quad (1.1.17)$$

alakban írhatjuk fel, ahol

$$\tilde{V}(t) \equiv e^{St\theta} \{ H - i\theta S \} e^{-St\theta}. \quad (1.1.18)$$

és a $\langle \dots \rangle_S$ jelölés az S hatásoperátorral képezett statisztikus középértékét jelöli.

Mivel a kollektív képnek megfelelően feltételezzük, hogy a próbarendszer spekt-
ruma jól közelíti a valódi alacsonyan fekvő gerjesztési spektrumot, ezért a $(H - i\theta S)$
mennyiségnek bizonyos átlagos értelemben kicsinek kell lennie. Ennek megfelelően
jó közelítésnek foghatjuk fel, ha a szabadenergia (1.1.17) kifejezését a $\tilde{V}(t)$ mennyi-
ség kumulánsai szerint sorba fejtjük és számításainkban a sorfejtés néhány első tag-
jára szorítkozunk. Megjegyezzük, hogy valamilyen x operátor kumulánsai (semi-
invariánsai) szerinti sorfejtést az α paraméter felhasználásával az alábbiakban szo-
kásos definiálni:

$$\ln \langle \exp \alpha x \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \alpha^n M_n(x) \quad (1.1.19)$$

ahol

$$M_1(x) = \langle x \rangle$$

$$M_2(x) = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$$

...

$$M_n(x) = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{d^n}{d\alpha^n} \ln \langle e^{\alpha x} \rangle$$

Az adott definíciónak megfelelően a szabadenergia (1.1.17) kifejezésének kumulánsok

szerinti sorfejtését

$$F = -\theta \ln Sp e^{-is} - \theta \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} M_n \left[-i \int_0^{-i/\theta} dt \tilde{V}(t) \right] \quad (1.1.20)$$

alakban írhatjuk fel. Nem kívánjuk itt most részletesen ismertetni a számítások technikáját, csupán a végeredmények rövid összefoglalására szorítkozunk. Ha a szabadenergia (1.1.20) kifejezésében a kumulánsok szerinti sorfejtés első tagjánál megállunk, a variációs elvet alkalmazva arra az eredményre jutunk, hogy a $\Phi_{1m}(t_1 - t_2)$ variációs paraméter az időtől független, vagyis az első közelítésben a self-consistens fononok élettartama végtelennek adódik és a kristály potenciális energiájának csak a páros rendű deriváltjai jelennek meg a $\langle U(\vec{R}_1, \dots, \vec{R}_N) \rangle$ kifejezésében (Vö. (1.1.7) formula). Tehát ebben az esetben visszajutottunk a korábban már tárgyalt self-consistens fonon közelítésre.

A kumuláns sorfejtés második tagjának a figyelembevétele a szabadenergia (1.1.20) kifejezésében a fononfrekvenciák eltolódására és a fononok véges élettartamára vezet [56], [65]. Megjegyezzük, hogy ezek az eredmények összhangban vannak a perturbációszámítás szokásos módszereivel nyert eredményekkel: a fononok csillapodása és a potenciális energia elmozdulás-operátorok szerinti sorfejtése páratlan rendű (H_3) tagjainak járulékai csak másodrendben jelennek meg.

A dolgozatok második csoportjában [66]—[69] a diagramtechnikát használják fel az anharmonikus kristály self-consistens elméletének a felépítésére. Az elmélet e variánsát a legrészletesebben *Choquard* fejti ki a könyvében [69], míg egy ügyes rövid összefoglalását a [70] dolgozatban találhatjuk. A kiindulási pont itt is a szabadenergia kumulánsok segítségével előállított kifejezése. A kumulánsokat diagramok felhasználásával ábrázolják, és minden egyes kumulánsban felösszegezik a hozzá tartozó szelektált diagramok végtelen sorozatát. Megjegyezzük, hogy a diagramtechnika alkalmazása esetében is biztosítani lehet a self-consistens tárgyalásmódot. *Werthamer* megmutatta, hogy a self-consistens elméletnek a variációs elven, illetve a diagramtechnikán alapuló változatai ekvivalensek egymással [56], [65].

Az anharmonikus kristályok self-consistens elméletének általunk kidolgozott változatában [71]—[73] a két időargumentumos termodinamikai Green-függvényeket használjuk fel az elmélet felépítésére. Megjegyezzük, hogy dolgozataink alapján ezt az eljárást alkalmazta *Takeno* [74] is. Az elméletnek ebben a megfogalmazásában a fonon-operátorok mozgásegyenleteinek felhasználásával egyenletet vezetünk le a megfelelően megválasztott Green-függvényekre, és az egyenletben fellépő magasabb rendű — több fonon kölcsönhatását leíró — Green-függvények vonatkozásában megfelelő szétkapcsolási processzust alkalmazva egy self-consistens egyenletrendszer nyerünk, amely a kristály állapotegyenletével együtt egyértelműen meghatározza a kristály dinamikai, termodinamikai és rugalmas tulajdonságait. A self-consistens elméletnek ez a véleményünk szerint legegyszerűbb megfogalmazása lehetővé tette a közvetlenül szomszédos atomok párkölcsönhatását feltételezve a kristály tulajdonságainak a részletes elméleti vizsgálatát [75]—[84], bizonyos esetekben analitikus módszerekkel is. Az elméletet egy modellfeladat, az anharmonikus lineáris lánc tulajdonságainak a vizsgálatára is alkalmaztuk [85]—[89], [79]. E modellfeladat tanulmányozásakor találkoztunk elméletünk keretében először az instabilitás jelenségével [85].

Bevezetve az irreducibilis Green-függvényeket, lehetőség nyílt az alkalmazott szétválasztási eljárás pontosságának a diagramtechnika felhasználásával történő ellenőrzésére [90] és a szabadenergia kifejezésének az analízisből ki lehetett mutatni, hogy a két időargumentumos termodinamikai Green-függvények, illetve a diagramtechnika felhasználásán alapuló módszer ekvivalens [91]. Figyelembe véve a korábban mondottakat, evvel egyben bizonyítást nyert, hogy az anharmonikus kristályok self-consistens elméletének a fentiekben tárgyalt három, különböző technika felhasználásán alapuló változata ekvivalens egymással. Megjegyezzük, hogy a Green-függvényes technika alkalmazása esetén kiindulási közelítésnek a pszeudoharmonikus közelítést használjuk, amelynek keretében nem vesszük figyelembe a self-consistens fononok csillapodására vezető többfononos rugalmatlan szórási folyamatokat. A pszeudoharmonikus közelítés ekvivalens a korábban már említett self-consistens fonon közelítéssel.

A kvantumkristályok esetében az atomok nagy rezgési amplitúdói következtében a hard core korrelációknak lényeges szerepük van. Az anharmonikus kristályok elméletét ebben a vonatkozásban a [92]–[95] dolgozatokban fejlesztették tovább. A kvantumkristályok transzport-tulajdonságait a [96]–[98] dolgozatokban tárgyalták. Miután a kvantumkristályok tulajdonságainak a részletes tárgyalásával dolgozatunkban nem fogunk foglalkozni, ezért ezt a problémakört itt sem tárgyaljuk részletesebben.

Az utóbbi évek folyamán számos dolgozat jelent meg, amelyekben az anharmonikus kristályok self-consistens elmélete alapján elvégzett számítások eredményeit közlik egyrészt a Ne, Ar, Kr és Xe nemesgáz kristályokra [60], [64], [70], [99]–[108], másrészt a He^3 és He^4 kristályokra [58], [59], [61], [109]–[118] vonatkozóan. A kísérleti adatok és az elméleti eredmények összehasonlítása alapján megállapíthatjuk, hogy a fononok véges élettartamát alacsony rendben figyelembe véve az anharmonikus kristályok self-consistens elmélete meglehetősen jó leírását adja a kristályok dinamikai (fonon frekvenciák és vonalszélességek) [101]–[104], [110]–[112], [115], [117] és termodinamikai (hőkapacitás, kompresszibilitás stb.) [70], [105]–[108], [112] jellemzőinek a kristályok létezésének gyakorlatilag teljes hőmérsékleti tartományában.

Az anharmonikus kristályok self-consistens elméletének a Green-függvényes technikán alapuló változata kidolgozásával együtt bontakozott ki a ferromágneses kristályoknak a rácsrezgéseket figyelembe vevő elmélete [119]–[124].

A [71]–[73] dolgozatokban kifejtett elmélet alkalmazást talált a fémek elméletében [125], a folyadékok elméletében [126]–[129], valamint annak a hatásnak az elméleti vizsgálatánál [74], [130] is, amelyet a könnyű szennyező atomok a kristály tulajdonságaira gyakorolnak.

Miután dolgozatunkban a kristály instabilitásának a jelenségével is foglalkozunk, szükségesnek látszik néhány megjegyzést tenni e problémakörrel kapcsolatban is. A kristályrács dinamikai instabilitásával foglalkozó dolgozatok sorában az első egyike volt *Born* tanulmánya [131], amelyben egy tércentrált köbös kristályrács stabilitásának feltételeit vizsgálta, rövid hatótávolságú kölcsönhatást tételezve fel a kristályrács atomjai között. A kristályrács szabadenergiáját *Born* kváziharmonikus közelítésben írta fel. Kváziharmonikus közelítésnek szokásos nevezni azt a közelítést, amelynek a keretében a harmonikus közelítésből indulnak ki, de valamilyen empirikus törvény alapján a kristály hőtágulását figyelembe veszik. A hőtágulás számításba vétele következtében a rácsrezgések frekvenciái — ellentétben a har-

monikus közelítéssel — a rácsállandótól függővé válnak. Így a kváziharmonikus közelítésben empirikus alapon közvetve figyelembe veszik a kristályrács hőtágulására vezető anharmonikus kölcsönhatást, azonban számításban kívül hagyják a szabadenergia kifejezésében az anharmonikus kölcsönhatásból közvetlenül eredő tagokat (F_3 és F_4 típusú tagok, lásd pl. [8]). A szabadenergia ismeretében ki lehet számítani a kristály rugalmassági együtthatóit. Így a kristály állapotegyenletének és egy vagy több rugalmassági együttható zérussá válását leíró egyenletnek a szimultán megoldása a kristály stabilis állapotának a határfeltételét adja meg. *Born* feltételezte, hogy a kristály ily módon nyert instabilitási görbéje a kristály olvadási görbéjének felel meg. Jóllehet ebben a közelítésben számított olvadási hőmérsékletek (lásd pl. [132]) a kísérleti olvadási hőmérsékletekkel jó megegyezést mutatnak, azonban a kváziharmonikus közelítés nem tekinthető alkalmas közelítésnek a kristály olvadáspontja közelében, mert mint fentebb láttuk, az anharmonicitás már a $T > (0,3-0,5)T_m$ hőmérsékletnél lényeges és el nem hanyagolható szerepet játszik. Itt is utalunk arra a korábbi megállapításunkra, hogy a kvantumkristályok a kváziharmonikus közelítésben eleve instabiliseknek adódnak.

Az anharmonikus kristályoknak az általunk kidolgozott és az anharmonikus kölcsönhatást minden rendben figyelembe vevő self-consistens elmélete, mint azt a továbbiakban látni fogjuk, a kristály instabilitása jelenségének a felléptéhez vezet. Egy meghatározott hőmérséklet, a $T_s(P)$ instabilitási hőmérséklet elérésekor ugyanis a fononok frekvenciája komplex mennyiséggé válik, ami az adott kristályállapot instabilitását jelenti [5]. Megjegyezzük, hogy kis tömegű és gyengén kötött atomokból felépített kristály esetében, mint amilyen a hélium kristály, már a kvantummechanikai nullponti rezgések is elegendők lehetnek a kristálynak, mint az atomok kötött állapotának a lerombolására. Mint a továbbiakban látni fogjuk, a $T_s(P)$ instabilitási görbe mentén elsőrendű fázisátalakulás zajlik le. A kristály instabilitását illetően velünk megegyező eredményre jutott módszerünket alkalmazva *Heimendahl* [83] is. A [133] dolgozatban felhívták a figyelmet arra, hogy ha a fononoknak csak a bomlásukból (a Hamilton-operátor H_3 tagjából) eredő renormálását vesszük self-consistens módon figyelembe, a kristály instabilitása jelenségének a megjelenésére jutunk.

Megemlítjük továbbá, hogy a [134] dolgozatokban fél-fenomenologikus elmélet alapján tárgyalják az anharmonikus kristályok instabilitásának a jelenségét.

Az utóbbi években többen is foglalkoztak a *Bogoljubov*-féle $1/q^2$ elméletnek (q — a sűrűség-sűrűség korrelációs függvény hullámszáma) [135] az egy- és két-dimenziós kristálystruktúrák stabilitásának a vizsgálatára való alkalmazásával [136], [137]. Ezekben a dolgozatokban az instabilitás az atomok egyensúlyi helyzetének nagy fluktuációjával kapcsolatos, mint azt például a [136] dolgozatban is láthatjuk:

$$\langle u_n^2 \rangle \sim \begin{cases} T \cdot N & \text{egydimenziós esetben} \\ T \cdot \ln N & \text{kétdimenziós esetben} \end{cases} \quad \text{ha } T \neq 0^\circ \text{K}$$

és $\langle u_n^2 \rangle \sim \ln N$ egydimenziós esetben, ha $T=0^\circ \text{K}$. (N a rendszert alkotó atomok száma.) Ezek a fluktuációk az egy- és kétdimenziós rendszerekben teljes egészükben a dimenziók alacsony számával kapcsolatosak és harmonikus közelítésben éppen olyan nagyok, mint az anharmonikus kölcsönhatás figyelembevétele esetén.

Dolgozatunk 3. fejezetében a lineáris láncnak — az egydimenziós kristálynak — az anharmonikus kölcsönhatásból eredő instabilitásával fogunk foglalkozni. Víz-

gálatainkban mint független változókat az atomok relatív elmozdulását vezetjük be, amely egydimenziós esetben is kicsi: $\lim_{N \rightarrow \infty} \langle (u_n - u_{n+1})^2 \rangle^{1/2} = \text{const} \ll l$ (ahol l az atomok egyensúlyi távolsága), ami azt jelenti, hogy a lineáris rácsban létezik a közeli rend, és ebben az értelemben a lineáris láncot úgy tekinthetjük, mint az atomok kötött rendszerét, amelyben a kollektív gerjesztések, a fononok terjedhetnek [7]. A lineáris láncnak dolgozatunk 3. fejezetében tárgyalt, a kollektív gerjesztések terjedésével kapcsolatos instabilitása teljes egészében az anharmonikus effektusok által létrehozott instabilitás, és nincs kapcsolatban az atomok egyensúlyi helyzetének fluktuációjával.

Összefoglalóan megállapíthatjuk tehát, hogy az anharmonikus kristályok self-consistens elméletét ma már egy jól kialakult, kísérleti adatokkal megfelelően alátámasztott elméletnek tekinthetjük, amelynek a megfelelően általános, de amellett lehetőleg egyszerű megfogalmazása indokolt és hasznos.

Dolgozatunk célkitűzése: az anharmonikus kristályoknak a termodinamikai Green-függvények módszere felhasználásán alapuló self-consistens elmélete rendszeres kifejtése, az elmélet alkalmazása a kristályok tulajdonságait jellemző mennyiségeknek a meghatározására, és annak a bemutatása, hogy elméletünk milyen új fizikai eredményekre vezet.

A 2. fejezetben a kollektív kép keretében megalkotjuk a kristály Hamilton-operátorát. Megmutatjuk, hogy megfelelően megválasztott termodinamikai Green-függvények segítségével ki tudjuk fejezni a kristály fizikai tulajdonságait jellemző legfontosabb mennyiségeket. Ezután az anharmonikus kristályok self-consistens elméletét a pszeudoharmonikus közelítésben tárgyaljuk, majd részletesen kifejtjük az elméletet a fononok csillapodására vezető három-fononos rugalmatlan szórási folyamatok figyelembevételével.

A 3. fejezetben bemutatjuk az elmélet alkalmazását az anharmonikus lineáris lánc tulajdonságainak a vizsgálatára. E modell-feladat tárgyalását dolgozatunkban célszerűnek tartjuk, mivel ebben az esetben a számítások lényegesen egyszerűbbek és jobban áttekinthetők mint egy reális háromdimenziós kristály esetében.

A 4. fejezetben az anharmonikus kristályok self-consistens elmélete alapján széles hőmérsékleti és nyomáshatárok között vizsgáljuk a lapcentrált köbös Bravais-rácscsal rendelkező kristály tulajdonságait a közvetlenül szomszédos atomok centrális párkölcsönhatásának a figyelembevételével.

Az 5. fejezetben röviden összefoglaljuk az eredményeket.

2. A termodinamikai Green-függvények alkalmazása az anharmonikus kristályok self-consistens elméletében

Ebben a fejezetben az anharmonikus kristályoknak egy olyan self-consistens elméletét fejtjük ki, amelyik nem épül a harmonikus közelítésre, mint kiindulási közelítésre. Feladatunk megoldásához a statisztikus mechanika Green-függvényes módszerét fogjuk felhasználni.

Először is felírjuk a kristály Hamilton-operátorát. Majd bevezetjük a megfelelően megválasztott két időargumentumos termodinamikai Green-függvényeket és megmutatjuk, hogy segítségükkel megfelelő közelítésben ki tudjuk fejezni a kristály fizikai tulajdonságait jellemző legfontosabb mennyiségeket.

Ezután megfogalmazzuk az anharmonikus kristály self-consistens elméletének a legegyszerűbb közelítését, a pszeudoharmonikus közelítést, amelynek keretében nem vesszük figyelembe a kristályrács rezgéseinek a csillapodását, az elemi gerjesztések — a self-consistens fononok — véges élettartamát.

A kristály self-consistens elméletében figyelembe vehetők a fononok véges élettartamára vezető rugalmatlan szórési folyamatok is. A fononok csillapodására legalacsonyabb rendben a három-fononos rugalmatlan szórési folyamatok vezetnek. A self-consistens elméletnek a három-fononos rugalmatlan szórési folyamatokat figyelembe vevő megfogalmazásával zárjuk le a 2. fejezetet.

2.1. A kristály Hamilton-operátora

Tekintsünk egy V térfogatú, N számú azonos atomból felépített Bravais-rácsot. Feltételezzük, hogy a kristályt adiabatikus közelítésben [3]—[5] vizsgálhatjuk. Ebben az esetben a kristály U potenciális energiáját mint az atomok pillanatnyi helykoordinátáinak az $U = U(\vec{R}_1, \dots, \vec{R}_N)$ függvényét írhatjuk fel. A rendszer teljes Hamilton-operátora ekkor

$$\mathcal{H} = H + H_1 = \sum_i \frac{\vec{P}_i^2}{2M} + U(\vec{R}_1, \dots, \vec{R}_N) + H_1 \quad (2.1.1)$$

alakban írható, ahol \vec{P}_i és \vec{R}_i az i rácsponthoz tartozó M tömegű atom impulzus-, illetve helyzetvektor-operátora. Dolgozatunkban mindenütt olyan egységrendszert használunk, amelyben $\hbar = 1$. A kristályt deformáló \vec{F}_i külső erők hatását a H_1 Hamilton-operátor írja le, amelyet egyszerű esetben

$$H_1 = - \sum_{i,\alpha} F_i^\alpha R_i^\alpha \quad (2.1.2)$$

alakban írhatunk fel ($\alpha = x, y, z$).

Bevezetjük az I_α egyensúlyi helyzetből való elmozdulás u_i^α operátorait az

$$R_i^\alpha = \langle R_i^\alpha \rangle + u_i^\alpha \equiv I_\alpha + u_i^\alpha \quad (2.1.3)$$

definícióval, ahol a $\langle \dots \rangle$ szimbólum az 1. fejezetben már bevezetett statisztikai átlagérték-képzést jelöli (lásd az (1.1.4) formulát).

A \vec{P}_i impulzus-operátorok és az egyensúlyi helyzetből való elmozdulás u_i operátorai az

$$\begin{aligned} [u_i^\alpha; P_i^\beta] &= i\delta_{\alpha\beta}\delta_{ii'}, \\ [u_i^\alpha; u_i^\beta] &= [P_i^\alpha; P_i^\beta] = 0 \end{aligned} \quad (2.1.4)$$

felcserélési relációkat elégítik ki.

Fejtsük sorba a kristály potenciális energiáját az egyensúlyi helyzetből való elmozdulás operátorai szerint:

$$U(\vec{R}_1, \dots, \vec{R}_N) = U_0(\vec{l}_1, \dots, \vec{l}_N) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{1 \dots n} \Phi(1, \dots, n) u_1 \dots u_n \quad (2.1.5)$$

ahol az $u_1 = u_{i_1}^{\alpha_1}, \dots$, valamint a

$$\Phi(1, \dots, n) = \Phi_{i_1 \dots i_n}^{\alpha_1 \dots \alpha_n} = \nabla_{i_1}^{\alpha_1} \dots \nabla_{i_n}^{\alpha_n} U_0(\vec{l}_1, \dots, \vec{l}_N) \quad (2.1.6)$$

jelöléseket alkalmaztuk. $U_0(\vec{l}_1, \dots, \vec{l}_N)$ a kristályrács egyensúlyi helyzeti energiája, a kristály statikus energiája. A (2.1.5) sorfejtés felírásakor természetesen feltételeztük, hogy a potenciális energia összes deriváltja létezik.

A sorfejtés $\Phi(1, \dots, n)$ együtthatóit atomi erőállandóknak nevezzük. A $\Phi(1, \dots, n)$ n -ed rendű erőállandó mátrixok az $1, \dots, n$ indexeket illetően szimmetrikusak és több más feltételt is kielégítenek, amelyek a kristály potenciális energiája és annak deriváltjainak a szimmetria-transzformációkkal szembeni invarianciájából következnek [8]. Ezek figyelembevételével a kristály Hamilton-operátorát

$$H = \sum_l \frac{\vec{P}_l^2}{2M} + U_0(\vec{l}_1, \dots, \vec{l}_N) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{1 \dots n} \Phi(1, \dots, n) u_1 \dots u_n \quad (2.1.7)$$

alakban írhatjuk fel.

Célszerűnek bizonyul bevezetni az impulzus-operátor és az egyensúlyi helyzetből való elmozdulás operátorának a Fourier-transzformáltjait

$$u_l^\alpha = \frac{1}{\sqrt{NM}} \sum_{kj} e_{kj}^\alpha e^{i\vec{k}l} Q_{kj} \quad (2.1.8)$$

$$P_l^\alpha = \sqrt{\frac{M}{N}} \sum_{kj} e_{kj}^\alpha e^{i\vec{k}l} P_{kj}$$

ahol az $\vec{e}_{kj} = \vec{e}_{-\vec{k}j}$ polarizációs vektorok Bravais-rács esetében valósak, teljes és ortonormált rendszert alkotnak:

$$\sum_j e_{kj}^\alpha e_{kj}^\beta = \delta_{\alpha\beta}; \quad \sum_\alpha e_{kj}^\alpha e_{kj'}^\alpha = \delta_{jj'} \quad (2.1.9)$$

A \vec{k} értékek az első Brillouin-zónában fekszenek.

Az egyensúlyi helyzetből való elmozdulás operátorának a Fourier-komponense Q_{kj} és az impulzus-operátor Fourier-komponense P_{kj} , amelyek a harmonikus rács normálkoordinátáinak a szerepét játsszák, a

$$[Q_{kj}; P_{k'j'}] = i\Delta(\vec{k} + \vec{k}')\delta_{jj'} \quad (2.1.10)$$

$$[Q_{kj}; Q_{k'j'}] = [P_{kj}; P_{k'j'}] = 0$$

felcserélési relációknak tesznek eleget. Itt a $\Delta(\vec{k})$ Kronecker-függvény eggyel egyenlő mindazon esetekben, amikor a \vec{k} vektor az inverz rács vektorával egyenlő — beleértve a nulla-vektor esetét is —, és minden egyéb esetben zérussal egyenlő.

A Q_{kj} és P_{kj} operátorokat kifejezhetjük mint a b_{kj}^+ fonon keltő és a b_{kj} fonon eltüntető operátorok lineáris kombinációját

$$Q_{kj} = \frac{1}{(2\omega_{kj})^{1/2}} (b_{kj} + b_{-kj}^+) \equiv \frac{1}{(2\omega_{kj})^{1/2}} A_{kj} \quad (2.1.11)$$

$$P_{kj} = \frac{1}{i} \sqrt{\frac{\omega_{kj}}{2}} (b_{kj} - b_{-kj}^+) \equiv \frac{1}{i} \sqrt{\frac{\omega_{kj}}{2}} B_{kj}$$

ahol bevezettük a további számítások során előnyösnek bizonyult $A_{\vec{k}j} = A_{-\vec{k}j}^+$ és $B_{\vec{k}j} = -B_{-\vec{k}j}^+$ operátorokat, amelyek a

$$\begin{aligned} [B_{\vec{k}j}; A_{\vec{k}'j'}] &= 2\Delta(\vec{k} + \vec{k}')\delta_{jj'} \\ [A_{\vec{k}j}; A_{\vec{k}'j'}] &= [B_{\vec{k}j}; B_{\vec{k}'j'}] = 0 \end{aligned} \quad (2.1.12)$$

felcserélési relációknak tesznek eleget.

Az $\omega_{\vec{k}j}$ frekvenciákat és az $\vec{e}_{\vec{k}j}$ polarizációs vektorokat később self-consistens módon fogjuk meghatározni. A \vec{k} vektor a fonon kváziimpulzusát jelöli, a j egész számú index pedig megadja, hogy a szóban forgó fonon az energiaspektrum melyik ágához tartozik. Megjegyezzük, hogy az ágak száma Bravais-rács esetében három, mert a longitudinális rezgési ág mindig két transzverzális ággal párosul.

Ebben a reprezentációban a kristályrács (2.1.7) Hamilton-operátort

$$H = \sum_{\vec{k}} \frac{\omega_{\vec{k}}}{4} B_{\vec{k}}^+ B_{\vec{k}} + U_0 + \sum_{n=1} \frac{1}{n!} \sum_{k_1 \dots k_n} V_n(k_1 \dots k_n) A_{k_1} \dots A_{k_n} \quad (2.1.13)$$

alakban írhatjuk fel, ahol $k = \{\vec{k}, j\}$ és

$$\begin{aligned} V_n(k_1, \dots, k_n) &= \\ &= \sum_{l_1 \dots l_n} e^{i\vec{k}_1 l_1 + \dots + i\vec{k}_n l_n} \frac{(\vec{e}_{\vec{k}_1} \vec{\nabla}_{l_1})}{(2MN\omega_{k_1})^{1/2}} \dots \frac{(\vec{e}_{\vec{k}_n} \vec{\nabla}_{l_n})}{(2MN\omega_{k_n})^{1/2}} U_0(\vec{l}_1, \dots, \vec{l}_n) \end{aligned} \quad (2.1.14)$$

A $V_n(k_1, \dots, k_n)$ függvények szimmetrikusak a (k_1, \dots, k_n) változók felcserélését illetően és $\Delta(\vec{k}_1 + \dots + \vec{k}_n)$ -nel arányosak.

További vizsgálataink szempontjából a kristály Hamilton-operátorának (2.1.13) alakja bizonyult előnyösnek, és ezért általában ezt az alakot fogjuk számításainkban felhasználni. Láthatjuk, hogy a Hamilton-operátor (2.1.13) alakja nem kevésbé általános, mint a kiindulási (2.1.1) alak.

2.2. A kristály dinamikai jellemzői és a termodinamikai Green-függvények

A statisztikus mechanika Green-függvényes módszere a kondenzált rendszerek fizikájában igen hatásos módszernek bizonyult, és ott számos alkalmazást nyert. Ezt a módszert alkalmazzuk dolgozatunkban is: az anharmonikus kristályok self-consistens elméletét a két időargumentumos termodinamikai Green-függvények felhasználásával építjük fel. Ezek a függvények és a velük kapcsolatos matematikai módszerek ma már közismerteknek tekinthetők. Ezért nem érezzük szükségét annak, hogy a statisztikus mechanika Green-függvényes módszerét rendszeresen ismertes-sük, a termodinamikai Green-függvények tulajdonságait általánosan vizsgáljuk. Az idevágó bőséges irodalomból is csak szemelvényként hivatkozunk néhány alapvető munkára [12]–[18]. Dolgozatunkban a [18]-ban alkalmazott meghatározásokat és jelöléseket követjük.

Megmutatjuk, hogy megfelelően megválasztott két időargumentumos termodinamikai Green-függvények segítségével ki tudjuk fejezni a kristály dinamikai tulajdonságait jellemző legfontosabb mennyiségeket, és levezetünk a továbbiak szempontjából fontos néhány összefüggést.

Vezessük be a

$$G_{ll'}^{\alpha\beta}(t-t') = \langle\langle u_l^\alpha(t); u_{l'}^\beta(t') \rangle\rangle = -i\theta(t-t')\langle[u_l^\alpha(t), u_{l'}^\beta(t')]\rangle \quad (2.2.1)$$

két időpontos retardált termodinamikai Green-függvényt, ahol $\theta(t-t')$ a Heaviside-féle lépcsőfüggvényt jelenti, [... , ...] a zárójelben levő operátorok kommutátorát jelöli.

A (2.2.1) Green-függvény idő szerinti Fourier-transzformáltját

$$G_{ll'}^{\alpha\beta}(t-t') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} G_{ll'}^{\alpha\beta}(\omega) e^{-i\omega(t-t')} d\omega \quad (2.2.2)$$

$$G_{ll'}^{\alpha\beta}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} G_{ll'}^{\alpha\beta}(t) e^{i\omega t} dt$$

alakban írhatjuk fel.

Transzlációs szimmetriával rendelkező rendszer esetében célszerű bevezetni a (2.2.2) Green-függvény helykoordináták szerinti $\langle\langle Q_{kj}; Q_{kj} \rangle\rangle_\omega$ Fourier-transzformáltját is:

$$G_{ll'}^{\alpha\beta}(\omega) = \frac{1}{MN} \sum_{k,j,j'} e_{kj}^\alpha e_{kj'}^\beta e^{ik(l-l')} \langle\langle Q_{kj}; Q_{kj'}^\dagger \rangle\rangle_\omega \quad (2.2.3)$$

Bevezetjük végül a további számításainkban általában felhasznált

$$G_{kk'}(t-t') = \langle\langle A_{kj}(t); A_{kj'}^\dagger(t') \rangle\rangle = (2\omega_k \omega_{k'})^{1/2} \langle\langle Q_k(t); Q_{k'}(t') \rangle\rangle \quad (2.2.4)$$

Green-függvényt. Mivel az A_k operátorok a fonon keltő és eltüntető operátorok lineáris kombinációjaként fejezhetők ki, ezért a (2.2.1), illetve (2.2.4) egyrészecske Green-függvényeket egy-fonon Green-függvényeknek nevezzük.

Megmutatjuk, hogy a (2.2.1) Green-függvénynek konkrét fizikai jelentése, értelme van.

Tekintsünk egy egyensúlyi állapotban levő rendszert, amelyre egy külső perturbáló tér hat. A külső tér hatását a H_1^t időtől függő Hamilton-operátorral írjuk le. Vizsgáljuk meg, hogyan változik valamilyen A fizikai mennyiség $\langle A \rangle_0$ egyensúlyi átlagértéke a külső perturbáló tér hatására. Zubarev [13], [18] megmutatta, hogy H_1^t -ben lineáris közelítésben fennáll az

$$\langle A \rangle = \langle A \rangle_0 + \delta \langle A \rangle = \langle A \rangle_0 + \int_{-\infty}^{\infty} \langle\langle A(t); H_1^t(t') \rangle\rangle^{\text{ret}} dt' \quad (2.2.5)$$

összefüggés, mely szerint az A fizikai mennyiség átlagértékének a perturbáció hatására bekövetkező $\delta \langle A \rangle$ megváltozását lineáris közelítésben a $\langle\langle A(t); H_1^t(t') \rangle\rangle^{\text{ret}}$ retardált termodinamikai Green-függvény segítségével írhatjuk le. Alkalmazzuk ezt az általános elméletet az általunk vizsgált esetre.

Hasson a kristályrácsra egy $f_l(t)$ külső perturbáló tér, amelynek a hatását a

$$H_1^t = \sum_{l,\alpha} f_l^\alpha(t) R_l^\alpha = \frac{e^t}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega t} \sum_{l,\alpha} f_l^\alpha(\omega) R_l^\alpha \quad (2.2.6)$$

időtől függő Hamilton-operátorral írjuk le. Az atomoknak a külső tér hatására bekövetkező $\delta\langle u_l^\alpha(t) \rangle$ átlagos elmozdulását (2.2.5), (2.2.6) és (2.1.3) figyelembevételével

$$\delta\langle u_l^\alpha(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dt' \sum_{l'\beta} \langle\langle u_l^\alpha(t); u_{l'}^\beta(t') \rangle\rangle^{\text{ret}} f_{l'}^\beta(t') \quad (2.2.7)$$

alakban írhatjuk fel, tehát az atomoknak a külső perturbáló tér hatására fellépő $\delta\langle u_l^\alpha(t) \rangle$ átlagos elmozdulását éppen a (2.2.1) retardált termodinamikai Green-függvény segítségével fejezhetjük ki.

A (2.2.7) kifejezés Fourier-komponensekre felírva a

$$\delta\langle u_l^\alpha(\omega) \rangle = \sum_{l'\beta} G_{ll'}^{\alpha\beta}(\omega + i\epsilon) f_{l'}^\beta(\omega) \quad (2.2.8)$$

alakot ölti. Transzlációs szimmetriával rendelkező rendszer esetében a külső perturbációt célszerű síkhullámok alakjában felírni:

$$f_l^\beta(\omega) = \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}l} f^\beta(\vec{k}, \omega) \quad (2.2.9)$$

Ekkor az átlagos elmozdulás Fourier-komponenseit a

$$\delta\langle u^\alpha(\vec{k}, \omega) \rangle = \frac{1}{M} \sum_{j,j'} e_{\vec{k}j}^\alpha \langle\langle Q_{\vec{k}j}; Q_{\vec{k}j'}^\dagger \rangle\rangle_\omega \vec{e}_{\vec{k}j'} \vec{f}(\vec{k}, \omega) \quad (2.2.10)$$

kifejezés állítja elő. Megmutatjuk, hogy a kristály sűrűségének kis megváltozását a $\delta\langle \vec{u}(\vec{k}, \omega) \rangle$ elmozdulásoknak a \vec{k} vektor irányába eső összetevői írják le. E célból fejtsük sorba a ρ sűrűségoperátor $\rho_{\vec{k}}$ Fourier-komponensét az elmozdulások szerint:

$$\rho_{\vec{k}} = \sum_l e^{i\vec{k}R_l} \approx \sum_l e^{i\vec{k}l} (1 + i\vec{k}\vec{u}_l) = \rho_{\vec{k}}^0 + \delta\rho_{\vec{k}} \quad (2.2.11)$$

vagyis a rendszer sűrűségének a kis $\delta\rho_{\vec{k}}$ megváltozását a

$$\delta\rho_{\vec{k}}(\vec{k}, \omega) = i\{\vec{k}\delta\langle \vec{u}(\vec{k}, \omega) \rangle\} = \frac{i}{M} \sum_{j,j'} (\vec{k}\vec{e}_{\vec{k}j}) \langle\langle Q_{\vec{k}j}; Q_{\vec{k}j'}^\dagger \rangle\rangle_\omega \{\vec{e}_{\vec{k}j'} \vec{f}(\vec{k}, \omega)\} \quad (2.2.12)$$

összefüggés írja le a fenti megállapításunknak megfelelően.

Infinitézimálisan kis $f_l^\alpha(\omega)$ perturbáció esetén az atomok $\delta\langle u_l^\alpha(\omega) \rangle$ átlagos elmozdulásai ugyancsak kis mennyiségek minden ω frekvencián, kivéve a rezonanciafrekvenciákat, amelyeket a $G_{ll'}^{\alpha\beta}(\omega)$ Green-függvény pólusai határoznak meg. Következésképpen a kristályrács rezgési frekvencia-spektrumának — a fononok diszperziós görbéjének — a meghatározását visszavezettük a (2.2.1) Green-függvény pólus-helyei, illetve a csillapodás figyelembevétele esetén a Green-függvény maximumai helyének a meghatározására.

Többen is megmutatták (lásd, például [20]), hogy a lassú neutronok egy-fononos koherens rugalmatlan differenciális szórási hatáskeresztmetszete kifejezhető a (2.2.1) retardált Green-függvény segítségével:

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\epsilon} = a^2 \frac{q_1}{q_0} S_1(q, \omega) \quad (2.2.13)$$

ahol a a szórási hossz, q_0 és q_1 a neutron hullámvektora a kezdeti, illetve a végállapotban, $q = q_1 - q_0$ és

$$S_1(q, \omega) = \frac{1}{2\pi} \sum_{l, l'} \frac{e^{-2W_l(q)}}{e^{\omega/\theta} - 1} e^{iq(l-l')} q^\alpha q^\beta [-2 \operatorname{Im} G_{ll'}^{\alpha\beta}(\omega + i\delta)] \quad (2.2.14)$$

Itt $W_l(q)$ jelöli a Debye—Waller függvényt

$$W_l(q) = \frac{1}{2} \langle (\vec{q} \vec{u}_l)^2 \rangle = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} q^\alpha q^\beta \langle u_l^\alpha u_l^\beta \rangle \quad (2.2.15)$$

A lassú neutronok egy-fononos koherens rugalmatlan differenciális szórási hatáskeresztmetszetét mérve tehát kísérletileg meg lehet határozni a (2.2.1) retardált termodinamikai Green-függvényt és így a kristályrác rezgéseinek a spektrumát.

Láthatjuk tehát, hogy a (2.2.1) retardált termodinamikai Green-függvény fizikai tartalommal rendelkezik, és kísérletileg mérhető mennyiségekkel áll közvetlen kapcsolatban.

A Green-függvényes technika alkalmazása esetén a statisztikai átlagértékek kiszámításához ismernünk kell a megfelelő spektrálfüggvényt. Megmutatható, hogy az $I_l^{\beta\alpha}(\omega)$ spektrálfüggvény előállítható a $G_{ll'}^{\alpha\beta}(\omega)$ Green-függvény segítségével

$$G_{ll'}^{\alpha\beta}(\omega + i\delta) - G_{ll'}^{\alpha\beta}(\omega - i\delta) = -i(e^{\omega/\theta} - 1) I_l^{\beta\alpha}(\omega) \quad (2.2.16)$$

ahol ω valós és $\delta \rightarrow 0$. Ha a spektrálfüggvény valós, akkor egyszerű kapcsolat áll fenn a spektrálfüggvény és a Green-függvény képzetes része között:

$$\begin{aligned} \operatorname{Im} G_{ll'}^{\alpha\beta}(\omega)^{\text{ret}} &= -\frac{1}{2} (e^{\omega/\theta} - 1) I_l^{\beta\alpha}(\omega) \\ \operatorname{Im} G_{ll'}^{\alpha\beta}(\omega)^{\text{av}} &= \frac{1}{2} (e^{\omega/\theta} - 1) I_l^{\beta\alpha}(\omega) \end{aligned} \quad (2.2.17)$$

Mielőtt a (2.2.1) Green-függvényből lezármatatható korrelációs függvények vizsgálatára rátérnénk, tekintsük át a (2.2.1) Green-függvény szimmetria-tulajdonságait. [18] alapján a (2.2.1) Green-függvény egyik szimmetria-tulajdonságát a

$$G_{ll'}^{\alpha\beta}(\omega \pm i\delta) = G_{l'l}^{\beta\alpha}(-\omega \mp i\delta) \quad (2.2.18)$$

egyenlőség fejezi ki. Minthogy azonban az u_l^α operátorok hermitikus operátorok $u_l^{\alpha\dagger} = u_l^\alpha$ és mozgásegyenleteik az időtükrözéssel szemben invariánsok, levezethetjük a

$$G_{ll'}^{\alpha\beta}(\omega \pm i\delta) = G_{l'l}^{\beta\alpha}(\omega \pm i\delta) \quad (2.2.19)$$

összefüggést is. A (2.2.18) és (2.2.19) szimmetria-tulajdonságok a (2.2.1) Green-függvény képzetes részét illetően az

$$\operatorname{Im} G_{ll'}^{\alpha\beta}(\omega \pm i\delta) = \operatorname{Im} G_{l'l}^{\beta\alpha}(-\omega \mp i\delta) \quad (2.2.20)$$

$$\operatorname{Im} G_{ll'}^{\alpha\beta}(\omega \pm i\delta) = \operatorname{Im} G_{l'l}^{\beta\alpha}(\omega \pm i\delta) \quad (2.2.21)$$

összefüggésekre vezetnek, (2.2.17) alapján fennáll továbbá az

$$\operatorname{Im} G_{ll'}^{\alpha\beta}(\omega \pm i\delta) = -\operatorname{Im} G_{ll'}^{\alpha\beta}(\omega \mp i\delta) \quad (2.2.22)$$

összefüggés is. Megjegyezzük, hogy (2.2.20)–(2.2.22) felhasználásával további szimmetria-tulajdonságokat is levezethetünk a (2.2.1) Green-függvény képzetes részére, mint például:

$$\begin{aligned} \operatorname{Im} G_{ll'}^{\alpha\beta}(\omega \pm i\delta) &= -\operatorname{Im} G_{ll'}^{\alpha\beta}(\omega \mp i\delta) = \\ &= -\operatorname{Im} G_{ll'}^{\beta\alpha}(-\omega \pm i\delta) = -\operatorname{Im} G_{ll'}^{\beta\alpha}(-\omega \pm i\delta) \end{aligned} \quad (2.2.23)$$

A (2.2.17) összefüggés alapján a (2.2.1) Green-függvény fent ismertetett szimmetria-tulajdonságainak a felhasználásával könnyen beláthatjuk, hogy az $I_{ll'}^{\alpha\beta}(\omega)$ spektrál-függvényre fennáll az

$$I_{ll'}^{\alpha\beta}(\omega) = e^{-\omega/\theta} I_{ll'}^{\alpha\beta}(-\omega) = I_{ll'}^{\beta\alpha}(\omega) \quad (2.2.24)$$

összefüggés.

A (2.2.1) Green-függvényből több olyan korrelációs függvényt származtathatunk le, amelyek kísérletileg mérhető fizikai mennyiségekkel vannak közvetlen kapcsolatban. Határozzuk most meg ezeket a korrelációs függvényeket.

Az anharmonikus kristály dinamikai tulajdonságainak az elméleti vizsgálatánál az egyik legfontosabb korrelációs függvénynek az atomok egyensúlyi helyzetükből való elmozdulásának a korrelációs függvénye bizonyult, amelyet (2.2.17) és (2.2.24) felhasználásával

$$\begin{aligned} \langle u_l^\alpha(t) u_{l'}^\beta(t') \rangle &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega(t'-t)} I_{ll'}^{\alpha\beta}(\omega) = \\ &= \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega(t'-t)} \{e^{\omega/\theta} - 1\}^{-1} \{-\operatorname{Im} G_{ll'}^{\alpha\beta}(\omega + i\delta)\} \end{aligned} \quad (2.2.25)$$

alakban írhatunk fel. Egybeeső $t=t'$ időargumentumok esetében az

$$\langle u_l^\alpha u_{l'}^\beta \rangle = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} d\omega \coth \left(\frac{\omega}{2\theta} \right) \{-\operatorname{Im} G_{ll'}^{\alpha\beta}(\omega + i\delta)\} \quad (2.2.26)$$

statisztikus átlagértéket kapjuk meg.

A (2.2.25) korrelációs függvény ismeretében kiszámíthatjuk az atomok sebesség-korrelációs függvényét is

$$\begin{aligned} \langle \dot{u}_l^\alpha(t) \dot{u}_{l'}^\beta(t') \rangle &= \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial}{\partial t'} \langle u_l^\alpha(t) u_{l'}^\beta(t') \rangle = \\ &= \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{\omega^2}{e^{\omega/\theta} - 1} e^{-i\omega(t'-t)} \{-\operatorname{Im} G_{ll'}^{\alpha\beta}(\omega + i\delta)\} \end{aligned} \quad (2.2.27)$$

A (2.2.27) sebesség-korrelációs függvény segítségével pedig könnyen felírhatjuk a kristály átlagos kinetikus energiáját:

$$\langle T \rangle = \sum_l \frac{\langle \vec{P}_l^2 \rangle}{2M} = \sum_{l,\alpha} \frac{M}{2} \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} d\omega \omega^2 \coth \frac{\omega}{2\theta} \{-\operatorname{Im} G_{ll}^{\alpha\alpha}(\omega + i\delta)\} \quad (2.2.28)$$

Megjegyezzük, hogy az atomok sebesség-korrelációs függvényét közvetlenül mérhetjük a Mössbauer-effektus felhasználásával, ugyanis [138] alapján a $\Delta S^{(v)}$ Doppler-eltolódást

$$\Delta S^{(v)} = c \frac{\delta E_v}{E_\gamma} = \frac{1}{2c} \langle v_i^2 \rangle \quad (2.2.29)$$

alakban írhatjuk fel, ahol $\langle v_i^2 \rangle$ a rezoháns mag sebessége négyzetének az átlagértéke, E_γ a γ kvantum energiája, δE_v az energia eltolódás, c a fénysebesség.

Felírjuk még a (2.2.4) Green-függvény és a vele kapcsolatos $\langle A_k^\dagger A_k \rangle$ korrelációs függvény között fennálló

$$\langle A_k^\dagger A_k \rangle = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty d\omega \coth \left(\frac{\omega}{2\theta} \right) \{ -\text{Im } G_{kk}(\omega + i\delta) \} \quad (2.2.30)$$

összefüggést is.

Levezetünk most a (2.2.1) és (2.2.4) Green-függvényekre vonatkozó, a statisztikus középértékek kiszámításához fontos és a továbbiakban felhasználásra kerülő néhány összefüggést, ún. összesszabályt.

Bebizonyítjuk, hogy fennáll az

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty d\omega \omega I_{ll'}^{\alpha\beta}(\omega) (e^{\omega/\theta} - 1) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^\infty d\omega \omega \{ -\text{Im } G_{ll'}^{\alpha\beta}(\omega + i\delta) \} = \frac{1}{M} \delta_{\alpha\beta} \delta_{ll'} \quad (2.2.31)$$

összefüggés. A (2.2.31) összesszabály bizonyítása céljából az

$$\begin{aligned} \frac{1}{M} \langle [iP_l^\alpha(t); u_{l'}^\beta(t')] \rangle &= i \frac{\partial}{\partial t} \langle [u_l^\alpha(t); u_{l'}^\beta(t')] \rangle = \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty d\omega \omega I_{ll'}^{\alpha\beta}(\omega) \{ e^{\omega/\theta} - 1 \} e^{-i\omega(t-t')} \end{aligned} \quad (2.2.32)$$

egyenlőségből indulunk ki, amely $t=t'$ esetén (2.1.4) figyelembevételével a (2.2.31) egyenlőségre vezet.

A (2.2.31) összesszabály segítségével a $\langle iP_l^\alpha u_{l'}^\beta \rangle$ korrelációs függvényre a

$$2 \langle iP_l^\alpha u_{l'}^\beta \rangle = \delta_{\alpha\beta} \delta_{ll'} \quad (2.2.33)$$

összefüggést nyerjük. Kiindulva továbbá az

$$\frac{1}{M^2} \langle [iP_l^\alpha(t); iP_{l'}^\beta(t')] \rangle = i \frac{\partial}{\partial t} i \frac{\partial}{\partial t'} \langle [u_l^\alpha(t); u_{l'}^\beta(t')] \rangle \quad (2.2.34)$$

egyenlőségből a (2.2.31) összesszabály bizonyításával analóg módon könnyen beláthatjuk, hogy fennáll az

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty \omega^2 I_{ll'}^{\alpha\beta}(\omega) (e^{\omega/\theta} - 1) d\omega = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^\infty \omega^2 \{ -\text{Im } G_{ll'}^{\alpha\beta}(\omega + i\delta) \} d\omega = 0 \quad (2.2.35)$$

összegszabály is, amelyet könnyen általánosíthatunk

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \omega^{2n} I_{\Pi'}^{\alpha\beta}(\omega) (e^{i\omega/\theta} - 1) d\omega = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \omega^{2n} \{-\text{Im } G_{\Pi'}^{\alpha\beta}(\omega + i\delta)\} d\omega = 0 \quad (2.2.36)$$

vagyis mondhatjuk, hogy a spektrálfüggvények páros momentumai zérussal egyenlők.

A fentiekhez hasonló módon levezethetünk összegszabályt a $G_{kk'}(\omega)$ Green-függvényre vonatkozóan is

$$\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \omega d\omega \{-\text{Im } G_{kk'}(\omega + i\delta)\} = 2\omega_k \delta_{kk'} \quad (2.2.37)$$

és ekkor a $\langle P_k Q_{k'}^+ \rangle$ korrelációs függvényre a

$$2i \langle P_k Q_{k'}^+ \rangle = \langle B_k A_{k'}^+ \rangle = \delta_{kk'} \quad (2.2.38)$$

egyenlőséget nyerjük.

Az összegszabályokat érdemes úgy is megfogalmazni, mint a kristályrács rezgéseinek frekvencia-eloszlási függvényeire vonatkozó normálási feltételt:

$$\int_0^{\infty} G_j(\omega^2) d\omega^2 = 1 \quad (2.2.39)$$

ahol

$$G_j(\omega^2) = \frac{1}{\pi N} \sum_k \{-\text{Im} \langle\langle Q_{kj}; Q_{kj}^+ \rangle\rangle_{\omega + i\delta}\} \quad (2.2.40)$$

Megmutattuk tehát, hogy a kristályok dinamikai tulajdonságait leíró mennyiségeket kapcsolatba tudjuk hozni a (2.2.1) két időargumentumos retardált termodinamikai Green-függvényekkel, és e függvények vonatkozásában levezettünk több, a későbbiekben felhasználásra kerülő összefüggést.

2.3. A kristály szabadenergiája, belső energiája és állapotegyenlete

Megmutatjuk, hogy az anharmonikus kristály szabadenergiáját és belső energiáját megfelelő közelítésben ki tudjuk fejezni a bevezetett Green-függvények felhasználásával, majd levezetjük a kristály állapotegyenletét, amely meghatározza a kristály egyensúlyi paramétereit.

Először a kristály szabadenergiájának a meghatározásával foglalkozunk és megmutatjuk, hogy a szabadenergia kifejezését felírhatjuk, mint a bevezetett (2.2.4) egyfonon Green-függvénynek a fononok kölcsönhatási paramétere szerinti integrálját.

E célból vezessük be formálisan a kristályrács Hamilton-operátorának a (2.1.13) kifejezésébe a fononok λ kölcsönhatási paraméterét és bontsuk a Hamilton-operátort két részre

$$H(\lambda) = H_0 + H_1(\lambda) \quad (2.3.1)$$

ahol

$$H_0 = \frac{1}{4} \sum_k \omega_k \{B_k^+ B_k + A_k^+ A_k\} + U_0(\vec{l}_1, \dots, \vec{l}_N) \quad (2.3.2)$$

$$H_1(\lambda) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\lambda^n}{n!} \sum_{k_1 \dots k_n} V_n(k_1, \dots, k_n) A_{k_1} \dots A_{k_n} - \frac{\lambda^2}{4} \sum_k \omega_k A_k^+ A_k \quad (2.3.3)$$

Mint ismeretes, a szabadenergiát a $Z(\lambda)$ állapotösszeg segítségével

$$F(\lambda) = -\theta \ln Z(\lambda) \quad (2.3.4)$$

alakban írhatjuk fel, ahol

$$Z(\lambda) = \text{Sp} \{ \exp [-H(\lambda)/\theta] \} \quad (2.3.5)$$

Differenciálva a szabadenergia (2.3.4) kifejezését a λ paraméter szerint a

$$\frac{\partial F(\lambda)}{\partial \lambda} = \frac{1}{Z(\lambda)} \text{Sp} \left\{ e^{-H(\lambda)/\theta} \frac{\partial H_1(\lambda)}{\partial \lambda} \right\} = \left\langle \frac{\partial H_1(\lambda)}{\partial \lambda} \right\rangle_{\lambda} \quad (2.3.6)$$

egyenletet nyerjük.

Másrészt a (2.2.38) egyenlőség alapján felírhatjuk az

$$\begin{aligned} & i \frac{\partial}{\partial t} \frac{1}{2} \sum_k \langle A_k^+(t) B_k(t) \rangle_{\lambda} = \\ & = \frac{1}{2} \sum_k \left\{ \left\langle \left(i \frac{\partial}{\partial t} A_k^+(t) \right) B_k(t) \right\rangle_{\lambda} + \left\langle A_k^+(t) \left(i \frac{\partial}{\partial t} B_k(t) \right) \right\rangle_{\lambda} \right\} = \\ & = \frac{1}{2} \sum_k \{ \langle [A_k^+, H] B_k \rangle_{\lambda} + \langle A_k^+ [B_k, H] \rangle_{\lambda} \} = 0 \end{aligned} \quad (2.3.7)$$

azonosságot. Figyelembe véve azonban az $A_k(t)$ és a $B_k(t)$ Heisenberg-operátoroknak a (2.3.1) Hamilton-operátorral képzett mozgásegyenleteit:

$$i \frac{d}{dt} A_k(t) = [A_k, H(\lambda)] = \omega_k B_k(t) \quad (2.3.8)$$

és

$$\begin{aligned} & i \frac{d}{dt} B_k(t) = [B_k, H(\lambda)] = \\ & = \omega_k A_k + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\lambda^n}{(n-1)!} \sum_{k_1 \dots k_n} V_n(-k, k_1 \dots k_n) A_{k_1} \dots A_{k_n} - \lambda^2 \omega_k A_k \end{aligned} \quad (2.3.9)$$

a (2.3.7) kifejezésből az

$$\frac{1}{2} \sum_k \omega_k \{ \langle B_k^+ B_k \rangle_{\lambda} - \langle A_k^+ A_k \rangle_{\lambda} \} = \lambda \left\langle \frac{\partial H_1(\lambda)}{\partial \lambda} \right\rangle_{\lambda} \quad (2.3.10)$$

összefüggésre jutunk. A kölcsönhatási paraméter szerint integrálva a (2.3.6) egyenletet a szabadenergiára (2.3.10) figyelembevételével az

$$F = F_0 + F_1 = F_0 + \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \frac{1}{2} \sum_k \omega_k \{ \langle B_k^+ B_k \rangle_{\lambda} - \langle A_k^+ A_k \rangle_{\lambda} \} \quad (2.3.11)$$

kifejezést nyerjük, ahol

$$F_0 = \theta \sum_k \ln 2 \sinh(\omega_k/2\theta) + U_0(\vec{l}_1, \dots, \vec{l}_N) \quad (2.3.12)$$

a szabadenergiának a H_0 Hamilton-operátor felhasználásával képzett nulladik közelítése ($\lambda=0$).

A szabadenergia (2.3.11) kifejezésének a jobb oldalán álló korrelációs függvények az egy-fonon Green-függvény segítségével könnyen kifejezhetők és így a szabadenergiára az

$$F = F_0 + \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \frac{1}{\pi} \int_0^\pi d\omega \coth(\omega/2\theta) \sum_k' \frac{\omega^2 - \omega_k^2}{\omega_k} \{-\text{Im } G_k(\omega + i\delta)\} \quad (2.3.13)$$

kifejezést nyerjük, vagyis ily módon a szabadenergia kifejezését előállítottuk az egy-fonon Green-függvény felhasználásával.

A szabadenergia (2.3.13) kifejezését más alakban is felírhatjuk. Felhasználva az $A_k(t)$ és a $B_k(t)$ operátorok (2.3.8) és (2.3.9) mozgásegyenleteit, a $G_{kk'}(\omega)$ Green-függvény mozgásegyenletét

$$(\omega^2 - \omega_k^2) G_{kk'}(\omega) = \delta_{kk'} 2\omega_k + 2\omega_k \left\{ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\lambda^n}{(n-1)!} \sum_{k_2 \dots k_n} V_n(-k, k_2 \dots k_n) \langle\langle A_{k_2} \dots A_{k_n} | A_{k'}^+ \rangle\rangle - \frac{\lambda^2}{2} \omega_k \langle\langle A_k | A_{k'}^+ \rangle\rangle \right\} \quad (2.3.14)$$

alakban írhatjuk fel. Bevezetve a

$$G_k^0(\omega) = \frac{2\omega_k}{\omega^2 - \omega_k^2} \quad (2.3.15)$$

Green-függvényt, a (2.3.14) egyenletet felírhatjuk Dyson-egyenlet alakjában

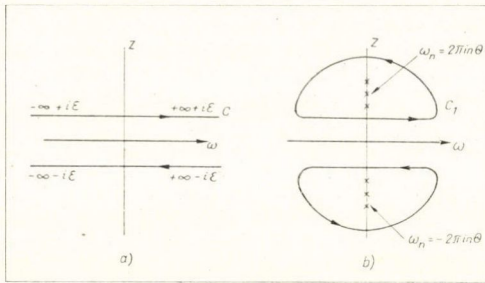
$$G_{kk'}(\omega) = G_k^0 \delta_{kk'} + G_k^0 \sum_{k_1} \Pi_{kk_1}(\lambda, \omega) G_{k_1 k'}(\omega) \quad (2.3.16)$$

ahol

$$\begin{aligned} & \sum_{k_1} \Pi_{kk_1}(\lambda, \omega) G_{k_1 k'}(\omega) = \\ & = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\lambda^n}{(n-1)!} \sum_{k_2 \dots k_n} V_n(-k, k_2 \dots k_n) \langle\langle A_{k_2} \dots A_{k_n} | A_{k'}^+ \rangle\rangle - \frac{\lambda^2}{2} \omega_k \langle\langle A_k | A_{k'}^+ \rangle\rangle \end{aligned} \quad (2.3.17)$$

A $G_{kk'}(\omega)$ Green-függvény $\Pi_{kk_1}(\lambda, \omega)$ tömegoperátora felhasználásával a szabadenergia kifejezését

$$\begin{aligned} F &= F_0 + \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{e^{\omega/\theta} - 1} i \sum_{kk_1} \{ \Pi_{kk_1}(\omega + i\delta) G_{k_1 k}(\omega + i\delta) - \\ & \quad - \Pi_{kk_1}(\omega - i\delta) G_{k_1 k}(\omega - i\delta) \} = \\ &= F_0 + \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{e^{\omega/\theta} - 1} \left[-2 \sum_{k, k_1} \{ \text{Re } \Pi_{kk_1}(\omega) \text{Im } G_{k_1 k}(\omega + i\delta) + \right. \\ & \quad \left. + \text{Re } G_{k_1 k}(\omega) \text{Im } \Pi_{kk_1}(\omega + i\delta) \} \right] \end{aligned} \quad (2.3.18)$$



2.1 ábra. A Green-függvény integrálásának útja a komplex frekvencia-síkon

rán láthatjuk. Ekkor a residuum-tétel felhasználásával a szabadenergiára az

$$\begin{aligned}
 F &= F_0 + \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \frac{i}{2\pi} \int_C dz (e^{z/\theta} - 1)^{-1} \sum_{k,k_1} \Pi_{kk_1}(z) G_{k_1k}(z) = \\
 &= F_0 - \theta \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \sum_{\omega_n} \sum_{k,k_1} \Pi_{kk_1}(\omega_n) G_{k_1k}(\omega_n)
 \end{aligned} \quad (2.3.19)$$

kifejezést nyerjük. A [29] és [30] dolgozatokban ezt a kifejezést a kauzális Green-függvények felhasználásával állították elő. Megjegyezzük, hogy $\Pi(\omega=0)=0$ ennek következtében az ω_n gyök $n=0$ esetében járulékot nem ad.

Miután megmutattuk, hogy a szabadenergia kifejezését elő tudjuk állítani az egy-fonon Green-függvény segítségével, térjünk át a kristály belső energiájának a meghatározására. A (2.1.7) Hamilton-operátorral leírt kristály belső energiáját az

$$E = \langle H \rangle = \sum_i \frac{\langle \vec{P}_i^2 \rangle}{2M} + U_0(\vec{l}_1, \dots, \vec{l}_N) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{1, \dots, n} \Phi(1, \dots, n) \langle u_1 \dots u_n \rangle \quad (2.3.20)$$

kifejezés adja meg. E kifejezés első tagja, a kristály átlagos kinetikus energiája (2.2.28) alapján kifejezhető az egy-fonon Green-függvény segítségével, így a továbbiakban csak a potenciális energia kifejezésével kell foglalkoznunk. A kristály átlagos potenciális energiája kiszámításához (2.1.8), (2.1.11) és (2.1.14) felhasználásával írjuk át a potenciális energia kifejezését és úgy, mint a szabadenergia számításánál, vezessük be a λ formális paramétert. Ekkor írhatjuk

$$\langle U(\lambda) \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\lambda^n}{n!} \sum_{k_1 \dots k_n} V_n(k_1 \dots k_n) \langle A_{k_1} \dots A_{k_n} \rangle \quad (2.3.21)$$

Differenciáljuk a (2.3.21) kifejezést a λ paraméter szerint

$$\frac{\partial}{\partial \lambda} \langle U(\lambda) \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\lambda^{n-1}}{(n-1)!} \sum_{k_1 \dots k_n} V_n(k_1 \dots k_n) \langle A_{k_1} \dots A_{k_n} \rangle \quad (2.3.22)$$

A (2.3.22) egyenlet jobb oldalán fellépő n -fonon korrelációs függvényeket közelítőleg előállíthatjuk az alacsonyabb rendű korrelációs függvények segítségével. Ekkor a két-fonon és három-fonon korrelációs függvényekre szorítkozva a (2.3.22) kifejezést közelítőleg

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \lambda} \langle U(\lambda) \rangle &\approx \\ &\approx \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\lambda^{n-1}}{(n-1)!} \sum_{k_1 \dots k_n} V_n(k_1 \dots k_n) \left\{ \langle A_{k_3} \dots A_{k_n} \rangle (n-1) \langle A_{k_1} A_{k_2} \rangle + \right. \\ &\quad \left. + \langle A_{k_4} \dots A_{k_n} \rangle \frac{(n-1)(n-2)}{2} \langle A_{k_1} A_{k_2} A_{k_3} \rangle \right\} = \\ &= \lambda \sum_{l,m} \langle (\vec{u}_l \vec{\nabla}_l) (\vec{u}_m \vec{\nabla}_m) \rangle \langle U(\lambda) \rangle + \frac{\lambda^2}{2} \sum_{l,m,n} \langle (\vec{u}_l \vec{\nabla}_l) (\vec{u}_m \vec{\nabla}_m) (\vec{u}_n \vec{\nabla}_n) \rangle \langle U(\lambda) \rangle \quad (2.3.23) \end{aligned}$$

alakban írhatjuk fel. A $\lambda=0$ és $\lambda=1$ határok között integrálva a (2.3.23) egyenletet a λ formális paraméter szerint a potenciális energia átlagos értékére az

$$\begin{aligned} \langle U \rangle &= \exp \left\{ \frac{1}{2} \sum_{l,m} \langle (\vec{u}_l \vec{\nabla}_l) (\vec{u}_m \vec{\nabla}_m) \rangle \right\} \times \\ &\times \exp \left\{ \frac{1}{6} \sum_{l,m,n} \langle (\vec{u}_l \vec{\nabla}_l) (\vec{u}_m \vec{\nabla}_m) (\vec{u}_n \vec{\nabla}_n) \rangle \right\} U_0(l_1, \dots, l_N) \quad (2.3.24) \end{aligned}$$

kifejezést nyerjük. Feltételezve, hogy az elmozdulás-operátorok hármasszorzatának középértékét tartalmazó második tényező járuléka kicsiny, a második hatványfüggvényt sorba fejtve a potenciális energia átlagértékét közelítőleg

$$\langle U \rangle \approx \left\{ 1 + \frac{1}{6} \sum_{l,m,n} \langle (\vec{u}_l \vec{\nabla}_l) (\vec{u}_m \vec{\nabla}_m) (\vec{u}_n \vec{\nabla}_n) \rangle \right\} \tilde{U}(l_1, \dots, l_N) \quad (2.3.25)$$

alakban írhatjuk fel, ahol bevezettük az

$$\tilde{U}(l_1, \dots, l_N) = \exp \left\{ \frac{1}{2} \sum_{l,m} \langle (\vec{u}_l \vec{\nabla}_l) (\vec{u}_m \vec{\nabla}_m) \rangle \right\} U_0(l_1, \dots, l_N) \quad (2.2.26)$$

függvényt, amely csak párkorrelációs függvényeket tartalmaz.

Számítsuk most még ki a második tag járulékát a (2.3.25) kifejezésben. Felhasználva a (2.3.10) összefüggést $\lambda=1$ esetében és a (2.3.23) kifejezést, írhatjuk

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \sum_{l,m,n} \langle (\vec{u}_l \vec{\nabla}_l) (\vec{u}_m \vec{\nabla}_m) (\vec{u}_n \vec{\nabla}_n) \rangle \langle U \rangle &\approx \left[\left\langle \frac{\partial H_1(\lambda)}{\partial \lambda} \right\rangle_{\lambda=1} \right] = \\ &= \frac{1}{2} \sum_k \omega_k \{ \langle B_k^+ B_k \rangle - \langle A_k^+ A_k \rangle \} = \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty d\omega \coth(\omega/2\theta) \sum_k \frac{\omega^2 - \omega_k^2}{\omega_k} \{ -\text{Im } G_k(\omega + i\delta) \} \quad (2.3.27) \end{aligned}$$

Mindezek alapján a kristály belső energiáját közelítőleg

$$E = \langle H \rangle \approx U_0(\vec{l}_1, \dots, \vec{l}_N) + \tilde{U}(\vec{l}_1, \dots, \vec{l}_N) + \\ + \frac{1}{4\pi} \int_0^\infty d\omega \coth(\omega/2\theta) \sum_k \left(\frac{\omega^2}{\omega_k} + \frac{2}{3} \frac{\omega^2 - \omega_k^2}{\omega_k} \right) \{-\text{Im } G_k(\omega + i\delta)\} \quad (2.3.28)$$

alakban írhatjuk fel, tehát a kristály belső energiáját is ki tudjuk közelítőleg fejezni a korábban bevezetett egy-fonon Green-függvények segítségével.

Most levezetjük még a kristály állapotegyenletét. A kristály egyensúlyi állapota az adott \vec{F}_l külső deformáló erők hatása alatt alakul ki. Az egyensúlyi állapot feltétele az, hogy az egyensúlyi helyzetben levő bármely atomra ható eredő átlagos erő zérussal legyen egyenlő [7], [8]. Az egyensúlyi állapot feltételéből meghatározhatjuk az atomok egyensúlyi helyzetét. Vizsgáljuk meg e célból a $P_l^z(t)$ impulzusoperátor mozgásegyenletét és képezzük annak a statisztikai átlagértékét. Abból kiindulva, hogy egyensúlyi állapotban bármelyik atom átlagos gyorsulása zérussal egyenlő, az atomok egyensúlyi távolságának, l_α -nak meghatározására az alábbi egyenletet nyerjük:

$$i \frac{\partial}{\partial t} \langle i P_l^z(t) \rangle = \langle [i P_l^z, \mathcal{H}] \rangle = \left\langle \frac{\partial U}{\partial R_l^z} \right\rangle - F_l^z = 0 \quad (2.3.29)$$

A (2.3.29) egyenletet további számításainkhoz célszerű más alakban felírni. Tekintsük a kristály $u_{\alpha\beta}$ infinitézimális homogén deformációját, amikor is az atomoknak az egyensúlyi helyzetükből történő δl_α elmozdulását a

$$\delta l_\alpha = \sum_\beta u_{\alpha\beta} l_\beta \quad (2.3.30)$$

összefüggés fejezi ki. Ekkor a külső deformáló erők által végzett $-\delta \langle H_1 \rangle$ munkát a $\sigma_{\alpha\beta}$ feszültségtenzor definíciójának megfelelően [8]

$$-\delta \langle H_1 \rangle = V \sum_{\alpha\beta} u_{\alpha\beta} \sigma_{\alpha\beta} = \sum_{l,\alpha} F_l^z \delta l_\alpha = \sum_{l,\alpha,\beta} F_l^z u_{\alpha\beta} l_\beta \quad (2.3.31)$$

alakban írhatjuk fel. Figyelembe véve azonban, hogy $u_{\alpha\beta}$ tetszés szerinti és felhasználva a (2.3.29) egyenletet, írhatjuk

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{1}{V} \sum_l F_l^z l_\beta = \frac{1}{V} \sum_l \left\langle \frac{\partial U}{\partial R_l^z} \right\rangle l_\beta \quad (2.3.32)$$

A (2.3.32) összefüggés a P izotróp külső nyomás esetében a

$$P = -\frac{1}{3} \sum_\alpha \sigma_{\alpha\alpha} = -\frac{1}{3V} \sum_{l,\alpha} \left\langle \frac{\partial U}{\partial R_l^z} \right\rangle l_\alpha \quad (2.3.33)$$

alakot ölti, ahol az átlagos potenciális energiát a (2.3.25) egyenlet határozza meg.

A (2.3.33) egyenlet a kristály állapotegyenlete, amely összefüggést állapít meg a P nyomás és a rácspontok l_α egyensúlyi távolsága között, vagyis meghatározza a kristályrács egyensúlyi paramétereit. Az állapotegyenlet (2.3.33) alakjában az átlagos potenciális energia szerepel, így (2.3.25) figyelembevételével az állapotegyenlet is kifejezhető a bevezetett egy-fonon Green-függvények segítségével.

Ezzel megmutattuk, hogy a kristály dinamikai és termodinamikai tulajdonságait jellemző mennyiségeket megfelelő közelítésben ki tudjuk fejezni a bevezetett egy-fonon Green-függvények segítségével, vagyis ha valamilyen módon sikerül meghatározni ezeket a Green-függvényeket, akkor felhasználásukkal a kristály tulajdonságait a levezetett összefüggések segítségével le tudjuk írni.

A továbbiakban a Green-függvények meghatározásának a problémájával fogunk foglalkozni.

2.4. A pszeudoharmonikus közelítés

Mielőtt az anharmonikus kristályok self-consistens elméletének általános megfogalmazására rátérnénk, vizsgáljuk meg annak legegyszerűbb közelítését, a pszeudoharmonikus közelítést, amely nem veszi figyelembe a kristályrács rezgéseinek csillapodását, az elemi gerjesztések — a self-consistens fononok — véges élettartamát.

A kristály tulajdonságait leíró mennyiségek kiszámításához, mint az előzőekben láttuk, ismernünk kell az egy-fonon Green-függvényt. Az egy-fonon Green-függvény kiszámítására a Green-függvény mozgásegyenletét használhatjuk fel. A (2.2.1) Green-függvény mozgásegyenletének felírásához szükségünk lesz a $u_l^\alpha(t)$ és $P_l^\alpha(t)$ operátoroknak a (2.1.1) és (2.1.7) Hamilton-operátorokkal képzett mozgásegyenleteire, ezért először ezeket az egyenleteket írjuk fel:

$$i \frac{\partial}{\partial t} u_l^\alpha(t) = \frac{i}{M} P_l^\alpha(t) \quad (2.4.1)$$

$$i \frac{\partial}{\partial t} i P_l^\alpha(t) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{1 \dots n} \Phi_l^\alpha(1 \dots n) u_1 \dots u_n - F_l^\alpha$$

A (2.2.1) Green-függvényt kétszer differenciálva a t idő szerint és figyelembe véve a (2.4.1) egyenleteket, a $G_{ll'}^{\alpha\beta}(t-t')$ Green-függvény mozgásegyenletét

$$\begin{aligned} M i^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} G_{ll'}^{\alpha\beta}(t-t') = \\ = \delta_{\alpha\beta} \delta_{ll'} \delta(t-t') + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{1 \dots n} \Phi_l^\alpha(1 \dots n) \langle \langle u_1(t) \dots u_n(t); u_l'^\beta(t') \rangle \rangle \end{aligned} \quad (2.4.2)$$

alakban írhatjuk fel. Mint láthatjuk, a H_1 Hamilton-operátor nem ad járulékot a mozgásegyenlethez.

A $G_{ll'}^{\alpha\beta}(t-t')$ egy-fonon Green-függvény mozgásegyenletének a jobb oldalán fellépnek a két-fonon, három-fonon, ..., n -fonon Green-függvények is, ahol n , a fononok száma, tetszőlegesen nagy lehet. A (2.4.2) egyenlet megoldására a szétkapcsolás módszerét alkalmazzuk. Tekintsük először a legegyszerűbb szétkapcsolást, vagyis azt a szétkapcsolást, amikor a sok-fonon Green-függvényt csak az egy-fonon Green-függvény segítségével fejezzük ki közelítőleg

$$\langle \langle u_1 \dots u_n; u_l'^\beta(t') \rangle \rangle = \sum_{i=1}^n \langle \langle u_i; u_l'^\beta(t') \rangle \rangle \left\langle \prod_{j \neq i}^n u_j \right\rangle \quad (2.4.3)$$

Ekkor a (2.4.2) egyenlet az egy-fonon Green-függvény vonatkozásában zárttá válik

és így a kapcsolódó Green-függvények végtelen egyenletláncá már az első tagnál megszakad. Bevezetve az egy-fonon Green-függvénynek a (2.2.2) és (2.2.3) formulák szerint képzett Fourier-transzformáltjait, az (2.4.2) mozgásegyenletet (2.4.3) figyelembevételével

$$M\omega^2 G_{ll'}^{\alpha\beta}(\omega) = \delta_{\alpha\beta} \delta_{ll'} + \sum_{m,\gamma} \tilde{\Phi}_{lm}^{\alpha\gamma} G_{ml'}^{\gamma\beta}(\omega) \quad (2.4.4)$$

alakban írhatjuk fel. Könnyen belátható, hogy a (2.4.4) egyenlet ugyanolyan alakú, mint amilyen alakú egyenletet nyerhetünk a harmonikus közelítésre szorítkozva, azonban a (2.4.4) egyenletben szereplő erő-állandó mátrix renormált:

$$\tilde{\Phi}_{lm}^{\alpha\gamma} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{1\dots n} \Phi_{lm}^{\alpha\gamma}(1\dots n) \langle u_1 \dots u_n \rangle = \left\langle \frac{\partial^2 U}{\partial R_l^\alpha \partial R_m^\gamma} \right\rangle \quad (2.4.5)$$

Ez ad alapot arra, hogy az itt tárgyalt közelítést renormált harmonikus vagy pszeudoharmonikus közelítésnek nevezzük.

A $\tilde{\Phi}_{lm}^{\alpha\gamma}$ pszeudoharmonikus erő-állandó mátrix (2.4.5) kifejezésében a potenciális energia második deriváltjának a kristály egyensúlyi állapotára képzett átlagos értéke szerepel, (2.3.25) figyelembevételével beláthatjuk, hogy ez az anharmonikus kölcsönhatás járulékaiknak a számításba vételét biztosítja.

Bevezetve a $G_{ml}^{\gamma\beta}(\omega)$ Green-függvénynek a helykoordináták szerinti Fourier-transzformáltjait (2.2.4) alapján, a (2.4.5) egyenlet megoldását

$$G_{ll'}^{\alpha\beta}(\omega) = \frac{1}{MN} \sum_{kj} \frac{e_{kj}^\alpha e_{kj}^\beta}{\omega^2 - \omega_{kj}^2} e^{i\vec{k}(\vec{l}-\vec{l}')} \quad (2.4.6)$$

alakban írhatjuk fel, ahol az ω_{kj} frekvenciákat az \vec{e}_{kj} polarizációs vektorokat az

$$M e_{kj}^\alpha \omega_{kj}^2 = \sum_{l,\beta} e_{kj}^\beta \tilde{\Phi}_{l0}^{\alpha\beta} e^{-i\vec{k}\vec{l}} \quad (2.4.7)$$

egyenlet határozza meg. A (2.4.7) egyenletből (2.4.5) figyelembevételével láthatjuk, hogy a rácsrezgések ω_{kj} frekvenciái pszeudoharmonikus közelítésben hőmérséklet-függő mennyiségek, hiszen kifejezésükben a korrelációs függvények szerepelnek. A kristályrács egyensúlyi paraméterei ugyancsak a hőmérséklet függvényei, hiszen a rács (2.3.33) állapotegyenletében, amelyet (2.1.5) figyelembevételével

$$P = -\frac{1}{3V} \sum_{l,\alpha} l_\alpha \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{1\dots n} \Phi_l^\alpha(1, \dots, n) \langle u_1 \dots u_n \rangle = -\frac{1}{3V} \sum_{l,\alpha} l_\alpha \tilde{\Phi}_l^\alpha \quad (2.4.8)$$

alakban is felírhatunk, a korrelációs függvények szerepelnek.

A pszeudoharmonikus közelítésben az n -fonon korrelációs függvények két-fonon korrelációs függvények szorzatára esnek szét. Állításunkat könnyen beláthatjuk a korrelációs függvények spektrál előállításának a felhasználásával. Írjuk fel az n -fonon korrelációs függvény spektrál előállítását:

$$\langle u_1 \dots u_n \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} (e^{i\omega/\theta} - 1)^{-1} \{-2 \operatorname{Im} G_{1\dots n}(\omega)\} d\omega \quad (2.4.9)$$

Ekkor a (2.4.9) egyenletben a $G_{1...n}(\omega)$ n -fonon Green-függvényre a (2.4.3) szétkapcsolást alkalmazva, a megfelelő korrelációs függvényre az

$$\langle u_1 \dots u_n \rangle_{ps} = (n-1) \langle u_1 u_2 \rangle \langle u_3 \dots u_n \rangle \quad (2.4.10)$$

összefüggést nyerjük. Ezt az eljárást tovább folytatva végül is a

$$\begin{aligned} \langle u_1, \dots, u_n \rangle_{ps} &= (n-1)(n-3), \dots, 3 \cdot 1 \langle u_1 u_2 \rangle \langle u_3 u_4 \rangle \dots \langle u_{n-1} u_n \rangle = \\ &= (n-1)!! \langle u_i u_{i+1} \rangle^{n/2} \quad (n=2k) \end{aligned} \quad (2.4.11)$$

összefüggésre jutunk. Következésképpen a pseudoharmonikus erő-állandó (2.4.5) kifejezése

$$\tilde{\Phi}_{lm}^{\alpha\gamma} = \nabla_l^\alpha \nabla_m^\gamma \left\{ e^{\frac{1}{2} \sum_{ij} \langle u_i u_j \rangle \nabla_i \nabla_j} U_0 \right\} = \nabla_l^\alpha \nabla_m^\gamma \tilde{U} \quad (2.4.12)$$

alakban írható fel és az állapotegyenlet (2.4.8) a

$$P = -\frac{1}{3V} \sum_{l,\alpha} l_\alpha \nabla_l^\alpha \tilde{U} \quad (2.4.13)$$

alakot ölti, ahol $\tilde{U} = \tilde{U}(\tilde{l}_1, \dots, \tilde{l}_N)$ a (2.3.26) átlagos potenciális energia a pseudoharmonikus közelítésben. Az egyenleteinkben előforduló két-fonon korrelációs függvények a (2.4.6) Green-függvények segítségével fejezhetők ki, vagyis a kristály dinamikai tulajdonságait leíró, a (2.4.6), (2.4.7), (2.4.12) és (2.4.13) egyenletekből álló egyenletrendszer self-consistenssé és zárttá vált.

A kristály szabadenergiáját és belső energiáját pseudoharmonikus közelítésben

$$\begin{aligned} F_{ps} &= F_0 + \tilde{U} - U_0 - \frac{1}{4} \sum_{kj} \omega_{kj} \coth(\omega_{kj}/2\theta) = \\ &= \theta \sum_{kj} \ln 2 \sinh(\omega_{kj}/2\theta) + \tilde{U} - \frac{1}{4} \sum_{kj} \omega_{kj} \coth(\omega_{kj}/2\theta) \end{aligned} \quad (2.4.14)$$

és

$$E_{ps} = \langle T \rangle + \tilde{U} \quad (2.4.15)$$

alakban írhatjuk fel, ahol a kinetikus energia átlagos értékét a (2.2.28) kifejezés adja meg.

A (2.4.12) és a (2.4.13) kifejezésekből láthatjuk, hogy a potenciális energia sorfejtésének páros rendű tagjai $\Phi(1, \dots, n)$ ($n=2, 4, \dots$) határozzák meg a rácsrezgések frekvenciáját, míg a páratlan rendű anharmonikus tagok $\Phi(1, \dots, n)$ ($n=1, 3, 5, \dots$) a kristályrács egyensúlyi paramétereit határozzák meg.

Az itt tárgyalt pseudoharmonikus közelítés ekvivalens a kristály self-consistens elméletének a variációs elv alapján kidolgozott változatában bevezetett self-consistens fonon közelítéssel, amelyet dolgozatunk első fejezetében ismertettünk. Erről könnyen meggyőződhetünk, ha a (2.4.2) egyenletben a $\langle \langle u_1 \dots u_n; u_l^\beta(k') \rangle \rangle$ n -fonon Green-függvény esetében a középérték-képzést nem a (2.1.1) pontos Hamilton-operátorral végezzük el, hanem a (1.1.2)-ben definiált H_0 effektív harmonikus operátor felhasználásával. Ekkor ugyanis az n -fonon Green-függvény a Wick-tétel alapján egy-fonon Green-függvényekre esik szét, így éppen az általunk bevezetett (2.4.3) szétkapcsoláshoz jutunk, és a $\tilde{\Phi}_{lm}^{\alpha\beta}$ erő-állandó mátrix a (2.4.5) kifejezéssel definiált $\tilde{\Phi}_{lm}^{\alpha\beta}$ pseudoharmonikus erőállandó mátrixszal egyenlő: $\tilde{\Phi}_{lm}^{\alpha\beta} = \tilde{\Phi}_{lm}^{\alpha\beta}$. A pseudoharmonikus közelítés az elemi gerjesztések vonatkozásában a self-consistens tér köze-

lítésnek felel meg, hasonlóan mint az RPA közelítés a mágnesség elméletében [17] vagy az elektron-gáz elméletben [139].

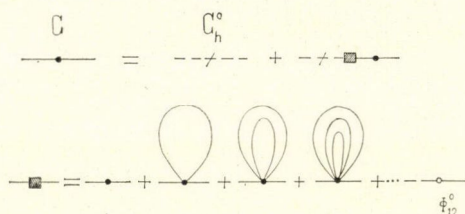
Vezessük be a $\hat{G}_{ll'}^{\alpha\beta}(\omega)$ Green-függvényt, amely az

$$\omega^2 M \hat{G}_{ll'}^{\alpha\beta}(\omega) = \delta_{ll'} \delta_{\alpha\beta} + \sum_{m,\gamma} \hat{\Phi}_{lm}^{\alpha\gamma} \hat{G}_{ml'}^{\gamma\beta}(\omega) \quad (2.4.16)$$

egyenletnek tesz eleget, ahol $\hat{\Phi}_{lm}^{\alpha\gamma}$ a harmonikus erő-állandó. A (2.4.16) egyenlettel definiált $\hat{G}_{ll'}^{\alpha\beta}(\omega)$ Green-függvény felhasználásával a (2.4.4) egyenletet felírhatjuk a

$$G_{ll'}^{\alpha\beta}(\omega) = \hat{G}_{ll'}^{\alpha\beta}(\omega) + \sum_{m,r,\gamma,\theta} \hat{G}_{lm}^{\alpha\gamma}(\omega) \{ \tilde{\Phi}_{mr}^{\gamma\theta} - \hat{\Phi}_{mr}^{\gamma\theta} \} G_{rl'}^{\theta\beta}(\omega) \quad (2.4.17)$$

Dyson-egyenlet alakjában. A 2.2 ábrán a $G_{ll'}^{\alpha\beta}(\omega)$ egy-fonon Green-függvény egyenletét ábrázoltuk sematikusán a pszeudoharmonikus közelítésben. Az ábra felső sorában fekete négyzettel ábrázolt renormált vertex-függvényt a második sorban ábrázoltuk sematikusán. Ott fekete körrel jelöltük a kiindulási (renormálatlan) vertexfüggvényt, a két-fonon korrelációs függvényeket a „buborékok” ábrázolják. Ez a sematikus ábrázolás egyrészt jól illusztrálja azt, hogy a pszeudoharmonikus közelítésben a self-consistens fonon tér diagramjainak a végtelen sorozata felösszegeződik, másrészt jól szemlélteti, hogy a két-fonon korrelációs függvényeket a $G_{ll'}^{\alpha\beta}(\omega)$



2.2 ábra. Az egy-fonon Green-függvény egyenletének sematikus ábrázolása pszeudoharmonikus közelítésben

Green-függvény — és nem a $\hat{G}_{ll'}^{\alpha\beta}(\omega)$ Green-függvény — felhasználásával számoljuk és így self-consistens tárgyalásmódot biztosítunk.

A számítások és az eredményül kapott formulák lényegesen egyszerűbbekké válnak, ha az atomok között párkölcsönhatást tételezünk fel. Érdemes röviden áttekinteni ezt az esetet, ugyanis így lehetőség nyílik az elmélet egyes jellegzetességeinek további diszkutálására. Párkölcsönhatás feltételezése esetében a potenciális energiát

$$U(\vec{R}_1, \dots, \vec{R}_N) = \frac{1}{2} \sum_{l \neq m} \varphi(\vec{R}_l - \vec{R}_m) \quad (2.4.18)$$

alakban írhatjuk fel. A renormált frekvenciát meghatározó (2.4.7) egyenletet ekkor

$$M e_{kj}^{\alpha} \omega_{kj}^2 = \sum_{l,\beta} (1 - e^{i\vec{k} \cdot \vec{l}}) e_{kj}^{\beta} \frac{\partial^2}{\partial l_{\alpha} \partial l_{\beta}} \tilde{\varphi}(\vec{l}) \quad (2.4.19)$$

alakban állíthatjuk elő és a potenciális energia pszeudoharmonikus közelítésben számított (2.3.26) átlagos értékét, amelyet a továbbiakban self-consistens potenciálnak fogunk nevezni, a

$$\tilde{\varphi}(\vec{l} - \vec{m}) = \exp \left\{ \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} D_{lm}^{\alpha\beta} \nabla_l^{\alpha} \nabla_l^{\beta} \right\} \varphi(\vec{l} - \vec{m}) \quad (2.4.20)$$

kifejezés adja meg, ahol $D_{lm}^{\alpha\beta}$ az egyensúlyi helyzetből való relatív elmozdulás korrelációs függvénye

$$D_{lm}^{\alpha\beta} = \langle (u_l^\alpha - u_m^\alpha)(u_l^\beta - u_m^\beta) \rangle = \frac{1}{MN} \sum_{kj} \frac{e_{kj}^\alpha e_{kj}^\beta}{\omega_{kj}} (1 - e^{ik(l-\bar{m})}) \coth(\omega_{kj}/2\theta) \quad (2.4.21)$$

A (2.4.19)–(2.4.21) egyenletek összevetése újra világosan érzékelteti a self-consistens tárgyalásmód alkalmazását. A renormált frekvenciát meghatározó (2.4.19) egyenletben a (2.4.20) self-consistens potenciál szerepel, ez utóbbit viszont a pszeudoharmonikus közelítésben pontos Green-függvény felhasználásával kiszámított párkorrelációs függvény segítségével számítjuk ki. Mint láthatjuk, a párkorrelációs függvény (2.4.21) kifejezésében az ω_{kj} renormált pseudoharmonikus frekvenciák szerepelnek. Itt jegyezzük meg, hogy a perturbációs közelítés alkalmazása esetében az egyenletek nem válnak self-consistenssé, mivel akkor a párkorrelációs függvényt a nulladik közelítés, vagyis a harmonikus közelítés Green-függvénye felhasználásával kell kiszámítani, tehát a párkorrelációs függvény (2.4.21) kifejezésének megfelelő kifejezésben nem a ω_{kj} pseudoharmonikus renormált, hanem a ω_{0kj} harmonikus frekvenciák szerepelnek, így az egyenletrendszer nem válik self-consistenssé.

A teljesség kedvéért felírjuk még a kristály állapot-egyenletét, a szabadenergia és a belső energia kifejezését, párkölcönhatást tételezve fel a kristályrács atomjai között

$$P = -\frac{1}{6v} \sum_{l,\alpha} l_\alpha \frac{\partial}{\partial l_\alpha} \tilde{\varphi}(\vec{l}) \quad (2.4.22)$$

$$F = \sum_{kj} \left\{ \theta \ln 2 \sinh(\omega_{kj}/2\theta) - \frac{\omega_{kj}}{4} \coth(\omega_{kj}/2\theta) \right\} + \frac{N}{2} \sum_l \tilde{\varphi}(\vec{l}) \quad (2.4.23)$$

$$E = \sum_{kj} \frac{\omega_{kj}}{4} \coth \frac{\omega_{kj}}{2\theta} + \frac{N}{2} \sum_l \tilde{\varphi}(\vec{l}) \quad (2.4.24)$$

ahol $v = V/N$.

E példa esetében is láthatjuk tehát, hogy a kristály tulajdonságainak a meghatározására pszeudoharmonikus közelítésben egy self-consistens egyenletrendszert nyerünk, amely egyenletrendszerhez a (2.4.19)–(2.4.22) egyenletek tartoznak. Megoldva ezt az egyenletrendszert, kiszámíthatjuk a kristály renormált rezgési frekvenciáját és egyensúlyi paramétereit, mint a hőmérséklet függvényét, mindezek ismeretében a (2.4.23) és (2.4.24) formulák segítségével ki tudjuk számítani a kristály szabadenergiáját és belső energiáját. A felsorolt mennyiségek ismeretében viszont a statisztikus mechanika, illetve a termodinamika általánosságban levezetett, jól ismert összefüggései felhasználásával számos, a kristály dinamikai, termikus és rugalmas tulajdonságát leíró mennyiséget tudunk kiszámítani.

Az általunk bevezetett pseudoharmonikus közelítéssel ekvivalens self-consistens fonon közelítést felhasználva többen is foglalkoztak a kvantumkristályok, illetve a nemesgáz kristályok tulajdonságait jellemző mennyiségek kiszámításával [58]–[62], [64], [67], [109]. Jóllehet a fenti dolgozatokban a nemesgáz kristályok tulajdonságait jellemző mennyiségeket széles hőmérsékleti határok között volt lehetőség kiszámítani, a kapott eredmények a kísérleti adatokkal nem elég jól egyeznek meg. Ennek

oka eléggé kézenfekvő. A pszeudoharmonikus közelítés ugyanis, mint láttuk, nem veszi számításba az anharmonikus kölcsönhatás minden járulékát, s így például a kölcsönhatás páratlan rendű tagjainak a járulécai nem szerepelnek az elemi gerjesztések energiájának renormálásánál (2.4.7), ill. (2.4.19) és a szabadenergia, valamint a belső energia (2.4.14), (2.4.15), (2.4.23), (2.4.24) kifejezéseiben. Mint a továbbiakban látni fogjuk, az anharmonikus kölcsönhatás páratlan rendű tagjai a fent említett kifejezésekben ugyanolyan nagyságrendű járulékot adnak második közelítésben, mint amilyen nagyságrendű járulékot adnak a páros rendű tagok első közelítésben. Ezt az állításunkat a perturbáció-számítás szokásos módszereivel elvégzett számítások eredményei is igazolják. Az anharmonikus kölcsönhatás páratlan rendű tagjainak a figyelembevétele lényegesen jobbá teszi az elméleti eredményeknek a kísérleti adatokkal való megegyezését, mint azt a [105] és [107] dolgozatokból láthatjuk.

Mielőtt a pszeudoharmonikus közelítés tárgyalását befejezzük, vizsgáljuk meg a (2.4.20) self-consistens potenciál fizikai jelentését. A párkölcsönhatás potenciáljának a Fourier-transzformáltját

$$\begin{aligned}\varphi(\vec{R}_l - \vec{R}_m) &= \sum_q \varphi(\vec{q}) e^{i\vec{q}(\vec{R}_l - \vec{R}_m)} \\ \varphi(\vec{q}) &= \frac{1}{V} \int d^3R \varphi(\vec{R}) e^{-i\vec{q}\vec{R}}\end{aligned}\quad (2.4.25)$$

alakban írhatjuk fel. Behelyettesítve (2.4.25)-t a self-consistens potenciál (2.4.20) kifejezésébe és elvégezve a \vec{q} szerinti integrálást [64], [109] a

$$\begin{aligned}\tilde{\varphi}(\vec{l} - \vec{m}) &= \\ &= \sum_q \varphi(\vec{q}) \exp \left\{ -\frac{1}{2} \langle [\vec{q}(\vec{u}_l - \vec{u}_m)]^2 \rangle \right\} e^{i\vec{q}(\vec{l} - \vec{m})} = \\ &= \{(2\pi)^3 \text{Det} |D_{lm}^{\alpha\beta}| \}^{-1/2} \int d^3R \varphi(\vec{l} - \vec{m} + \vec{R}) \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} R_\alpha (D_{lm}^{\alpha\beta})^{-1} R_\beta \right\}\end{aligned}\quad (2.4.26)$$

kifejezést nyerjük, amelyből könnyen leolvashatjuk a self-consistens potenciál fizikai jelentését. A potenciál pszeudoharmonikus renormálása, mint azt leolvashatjuk, azt jelenti, hogy a kiindulási potenciált az atomoknak az adott θ hőmérséklethez tartozó egyensúlyi helyzetükből történő viszonylagos elmozdulásának a tartományára Gauss-eloszlás szerint átlagoljuk. Az átlagérték-képzés következtében a self-consistens potenciál a távolságnak simább függvénye, mint a kölcsönhatási potenciál, a potenciálgödör mélysége kisebb, mint amilyen a kiindulási potenciál mélysége volt, és a potenciálfüggvény minimuma a koordináta-rendszer kezdőpontjától a nagyobb távolságok irányába tolódik el. Mindennek következtében, ha a hőmérséklet elég magas, illetve ha a nullponti rezgések energiája elég nagy, amikor is a $D_{lm}^{\alpha\beta}$ korrelációs függvények már nem eléggé kis mennyiségek, a self-consistens potenciál alakja már lényegesen különbözhet a kiindulási potenciál alakjától, a potenciál anharmonikus voltából eredő effektusok egyre lényegesebbé válhatnak, vagyis a kristály tulajdonságai lényegesen különbözhetnek a kristály harmonikus közelítésben számított tulajdonságaitól.

Illusztrációképpen vizsgáljuk meg a self-consistens potenciál viselkedését egydimenziós esetben. Az atomok közötti pár kölcsönhatás potenciálját egy modell-potenciállal, a Morse-potenciállal írjuk le

$$\varphi(r) = \epsilon \left\{ e^{-2ar_0 \left(\frac{r}{r_0} - 1 \right)} - 2e^{-ar_0 \left(\frac{r}{r_0} - 1 \right)} \right\} \quad (2.4.27)$$

ahol ϵ a potenciálgödör mélysége az $r=r_0$ helyen. A $D_{lm}^{\alpha\beta}$ korrelációs függvényt egydimenziós esetben a közvetlenül szomszédos atomok párkölcsönhatását feltételezve

$$D_{lm}^{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta} \langle (u_l - u_{l+1})^2 \rangle \equiv \delta_{\alpha\beta} \overline{u^2(l)} \quad (2.4.28)$$

alakban írhatjuk fel. Felhasználva a (2.4.20) és (2.4.27) kifejezéseket, a self-consistens potenciál (2.4.28) figyelembevételével ez esetben

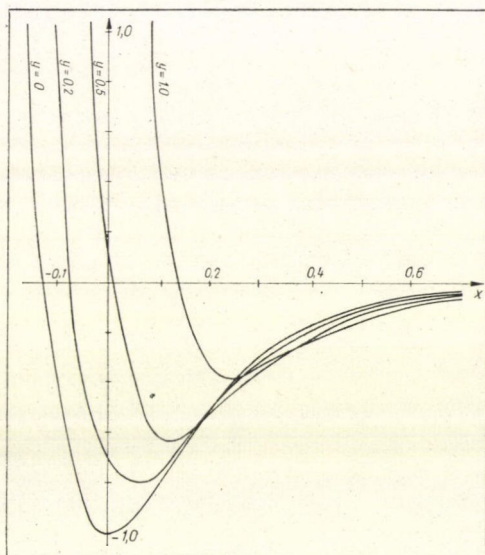
$$\tilde{\varphi}(x) = \epsilon \{ e^{-2ar_0 x} e^{2y} - 2e^{-ar_0 x} e^{y/2} \} \quad (2.4.29)$$

alakban írhatjuk fel, ahol $y = a^2 \overline{u^2(l)}$ és $x = (r/r_0) - 1$. A 2.3 ábrán a $\tilde{\varphi}(x)/\epsilon$ self-consistens potenciált ábrázoltuk y néhány értéke mellett. Megjegyezzük, hogy a Morse-potenciál $ar_0 = 6$ paraméter-megválasztás esetén az $|r - r_0| \langle \langle r_0$ tartománybankevessé különbözik a realisztikusabb Lennard—Jones (12—6) kölcsönhatási potenciáltól [69], ezért ábránkon is ezt a paraméter-megválasztást alkalmaztuk.

A self-consistens potenciál (2.4.29) kifejezésében a szomszédos atomok viszonylagos elmozdulásának négyzetes középértéke szerepel: $\overline{u^2(l)} = \langle (u_l - u_{l+1})^2 \rangle$ és nem az atom elmozdulása négyzetének az átlagértéke $\langle u_l^2 \rangle$, mint azt több dolgozatban korábban bevezették [49], [52]—[54]. Megjegyezzük, hogy ez utóbbi mennyiség, mint azt dolgozatunk 1. fejezetében láttuk, egydimenziós esetben még a $T = 0^\circ\text{K}$ hőmérsékleten is divergens, ellentétben az általunk használt $\overline{u^2(l)}$ mennyiséggel, amely egydimenziós esetben és véges hőmérsékleteken is véges mennyiség.

Jóllehet a pszeudoharmonikus közelítés nem biztosítja a kristály tulajdonságainak megfelelő leírását a kristály létezésének teljes hőmérsékleti tartományban, ez a közelítés mégis igen alkalmas kiindulási közelítésnek bizonyult az anharmonikus kristályok elméletében, és további számításaink során ezt a közelítést mint kiindulási közelítést fogjuk alkalmazni.

Megjegyezzük azonban, hogy a kristály tulajdonságait bizonyos értelemben kvazitív eléggé tükrözi a pszeudoharmonikus közelítés is, a számítások viszont a



2.3 ábra. A self-consistens potenciál $\tilde{\varphi}(x)/\epsilon$ ($x = r/r_0 - 1$)

pszeudoharmonikus közelítés alkalmazása esetén lényegesen egyszerűbbek és jobban áttekinthetők, mint a self-consistens fononok csillapodásának számításba vétele esetében. Az anharmonikus lineáris lánc tulajdonságait ezért pszeudoharmonikus közelítésben fogjuk tárgyalni. Megjegyezzük, hogy az instabilitás jelensége a pszeudoharmonikus közelítésben éppen úgy fellép és jellege ugyanolyan, mint a self-consistens elméletnek a fononok csillapodását is figyelembe vevő közelítéseiben. Az anharmonikus lineáris lánc tulajdonságait pszeudoharmonikus közelítésben korábban a [79], [85]—[88] dolgozatokban tárgyaltuk, a lapcentrált köbös ráccsal rendelkező kristály tulajdonságainak a vizsgálatával pszeudoharmonikus közelítésben a [75], [78]—[79] dolgozatok foglalkoznak.

2.5. Az anharmonikus kristály self-consistens elmélete

Az eddigiekben megmutattuk, hogy az anharmonikus kristályok tulajdonságait jellemző mennyiségeket ki tudjuk fejezni a megfelelően megválasztott termodinamikai Green-függvények felhasználásával. Ezután kiszámítottuk a termodinamikai Green-függvényeket a self-consistens elmélet legegyszerűbb közelítésében, a pszeudoharmonikus közelítésben, amelyben a self-consistens fononok csillapodását nem vesszük figyelembe és formulákat vezettünk le e közelítésben a kristály tulajdonságait leíró mennyiségek vonatkozásában. Most megfogalmazzuk az anharmonikus kristályok self-consistens elméletét legalacsonyabb rendben figyelembe véve a self-consistens fononok csillapodására vezető rugalmatlan szórási folyamatokat.

Az anharmonikus kristályoknak a self-consistens fononok rugalmatlan szórását is számításba vevő self-consistens elmélete kidolgozásakor célszerű a (2.2.4) egyenlőséggel bevezetett

$$G_{kk'}(t-t') = \langle \langle A_{\vec{k}j}(t); A_{\vec{k}'j'}^+(t') \rangle \rangle \quad (2.5.1)$$

két időpontos retardált termodinamikai Green-függvényekből kiindulni. Az (2.5.1) definiáló egyenlőség felírásánál a kristály transzlációs szimmetriáját figyelembe vettük, ezért $\vec{k} = \vec{k}'$. A (2.5.1) Green-függvény mozgásegyenlete felírásához elő kell állítani a (2.1.11) egyenlettel definiált $A_{\vec{k}}(t)$ és $B_{\vec{k}}(t)$ Heisenberg-operátoroknak a (2.1.1) Hamilton-operátorral képzett mozgásegyenletét. A keresett mozgásegyenleteket (2.1.2) és (2.1.13) felhasználásával

$$i \frac{\partial}{\partial t} A_{\vec{k}}(t) = \omega_{\vec{k}} B_{\vec{k}}(t) \quad (2.5.2)$$

$$i \frac{\partial}{\partial t} B_{\vec{k}}(t) = 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{k_1 \dots k_n} V_{n+1}(-\vec{k}, k_1 \dots k_n) A_{k_1} \dots A_{k_n} + [B_{\vec{k}}; H_1] \quad (2.5.3)$$

alakban írhatjuk fel, ahol a $V_n(k_1, \dots, k_n)$ függvényt a (2.1.14) egyenlet definiálja.

A (2.5.1) Green-függvényt kétszer differenciálva a t idő szerint és figyelembe véve a (2.5.2) és (2.5.3) mozgásegyenleteket, a (2.5.1) Green-függvény mozgásegyenletét

$$\begin{aligned} -\frac{\partial^2}{\partial t^2} G_{kk'}(t-t') &= \delta_{jj'} 2\omega_{\vec{k}} \delta(t-t') + \\ &+ 2\omega_{\vec{k}} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{k_1 \dots k_n} V_{n+1}(-\vec{k}, k_1 \dots k_n) \langle \langle A_{k_1} \dots A_{k_n}; A_{\vec{k}'}^+(t') \rangle \rangle \end{aligned} \quad (2.5.4)$$

alakban nyerjük eredményül. Megjegyezzük, hogy a H_1 Hamilton-operátor a Green-függvény (2.5.4) mozgásegyenletéhez nem ad járulékot.

A kapott (2.5.4) mozgásegyenlet jobb oldalán az $\langle\langle A_{k_1}, \dots, A_{k_n}; A_{k'}^+, (t') \rangle\rangle$ n -fonon Green-függvény áll, ahol n a fononok száma: $n=1, 2, \dots$, mint láthatjuk n a végtelenhez tart. A Green-függvénytechnikában általánosan használt eljárásnak megfelelően a (2.5.4) egyenlet megoldására a szétkapcsolás módszerét alkalmazzuk. Dolgozatunkban az n -fonon Green-függvényt közelítőleg az egy-fonon és két-fonon Green-függvény felhasználására korlátozódva

$$\begin{aligned} \langle\langle A_1 \dots A_{k_n}; A_{k'}^+(t') \rangle\rangle &\approx \sum_{i=1}^n \langle\langle A_{k_i}; A_{k'}^+(t') \rangle\rangle \left\langle \prod_{j \neq i}^n A_{k_j} \right\rangle + \\ &+ \sum_{i < j}^n \langle\langle A_{k_i} A_{k_j}; A_{k'}^+(t') \rangle\rangle \left\langle \prod_{l \neq i, j}^n A_{k_l} \right\rangle. \end{aligned} \quad (2.5.5)$$

alakban állítjuk elő. Így számításainkban csak a self-consistens fononok csillapodására legalacsonyabb rendben vezetett három-fononos rugalmatlan szórási folyamatokat vesszük figyelembe. *Plakida* [90] dolgozatában megmutatta, hogy a tárgyalt self-consistens elmélet általánosabban is megfogalmazható és a háromnál több fononnal kapcsolatos rugalmatlan szórási folyamatokat is figyelembe lehet venni. A [90] dolgozat eredményeit a Függelékben foglaljuk röviden össze.

A (2.5.5) szétkapcsolással meghatározott közelítésben az (2.5.4) egyenlet Fourier-transzformáltját

$$\begin{aligned} \omega^2 G_{kk'}(\omega) &= 2\omega_k \delta_{jj'} + 2\omega_k \sum_{k_1} \tilde{V}_2(-k, k_1) G_{k_1 k'}(\omega) + \\ &+ \omega_k \sum_{p, p'} \tilde{V}_3(-k, p, p') \langle\langle A_p A_{p'} | A_{k'}^+ \rangle\rangle_{\omega} \end{aligned} \quad (2.5.6)$$

alakban írhatjuk fel, ahol a \tilde{V}_2 és \tilde{V}_3 függvényeket (2.1.14) figyelembevételével a

$$\begin{aligned} \tilde{V}_2(-k, k') &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{k_1 \dots k_n} V_{n+2}(-k, k', k_1 \dots k_n) \langle A_{k_1} \dots A_{k_n} \rangle = \\ &= \frac{\Delta(\vec{k} - \vec{k}')}{MN} \sum_{l, m} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{l} - \vec{m})} \frac{(\vec{e}_k \cdot \vec{\nabla}_l)(\vec{e}_{k'} \cdot \vec{\nabla}_m)}{(2\omega_k 2\omega_{k'})^{1/2}} \langle U \rangle \end{aligned} \quad (2.5.7)$$

és

$$\begin{aligned} \tilde{V}_3(k, p, p') &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{k_1 \dots k_n} V_{n+3}(k, p, p', k_1 \dots k_n) \langle A_{k_1} \dots A_{k_n} \rangle = \\ &= \frac{\Delta(\vec{k} + \vec{p} + \vec{p}')}{(MN)^{3/2}} \sum_{l, m, t} e^{i\vec{k} \cdot \vec{l} + i\vec{p} \cdot \vec{m} + i\vec{p}' \cdot \vec{t}} \frac{(\vec{e}_k \cdot \vec{\nabla}_l)(\vec{e}_p \cdot \vec{\nabla}_m)(\vec{e}_{p'} \cdot \vec{\nabla}_t)}{(2\omega_k 2\omega_p 2\omega_{p'})^{1/2}} \langle U \rangle \end{aligned} \quad (2.5.8)$$

kifejezések határozzák meg. A (2.5.7) és (2.5.8) kifejezésekben szereplő $\langle U \rangle$ mennyiség a kristály átlagos potenciális energiája, amelyet a

$$\langle U \rangle = \langle U(\vec{R}_1, \dots, \vec{R}_N) \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{k_1, \dots, k_n} V_n(k_1 \dots k_n) \langle A_{k_1} \dots A_{k_n} \rangle \quad (2.5.9)$$

alakban írhatunk fel.

Könnyen beláthatjuk, hogy a (2.5.6) egyenletben a \tilde{V}_2 függvényt tartalmazó tag a fononok energiáját a pszeudoharmonikus közelítésben határozza meg, míg a \tilde{V}_3 függvényt tartalmazó tag a fononoknak a három-fononos rugalmatlan szórási folyamatokból eredő csillapodását írja le a self-consistens tér közelítésben. Miután a (2.5.5) szétkapcsolás a háromnál több fonon rugalmatlan szórásával kapcsolatos folyamatokat nem tartalmazza, természetesen a csillapodás kifejezésében sem jelenhetnek meg azok járulécai. Jogosnak tekinthető az a feltevés, hogy a magasabb rendű rugalmatlan szórási folyamatok kisebb járulékot adnak a fononok csillapodásához, mint a három fononos rugalmatlan szórási folyamatok.

A (2.5.6) egyenletben szereplő ω_k frekvenciák és $\tilde{\epsilon}_k$ polarizációs vektorok egyelőre meghatározatlanok. E mennyiségeket a pszeudoharmonikus közelítésben fogjuk kiszámítani, amikor is meghatározásukra a (2.4.5) és (2.4.7) egyenleteknek megfelelően az

$$\omega_{kj}^2 e_{kj}^2 = \frac{1}{MN} \sum_{l,m,\beta} e_{kj}^\beta e^{ik(l-m)} \nabla_l^\alpha \nabla_m^\beta \langle U \rangle \quad (2.5.10)$$

egyenletet írhatjuk fel. Ekkor azonban fennáll a

$$2\omega_k \tilde{V}_2(-k, k') = \omega_k^2 \delta_{kk'} \quad (2.5.11)$$

összefüggés és így a (2.5.6) egyenlet

$$(\omega^2 - \omega_k^2) G_{kk'}(\omega) = 2\omega_k \delta_{kk'} + \omega_k \sum_{p,p'} \tilde{V}_3(-k, p, p') G_{pp',k'}^{(1)}(\omega) \quad (2.5.12)$$

alakban írható fel, ahol a két-fonon Green-függvényre bevezettük a

$$G_{pp',k'}^{(1)}(t-t') = \langle\langle A_p(t) A_{p'}(t); A_{k'}^+(t') \rangle\rangle \quad (2.5.13)$$

jelölést. A (2.5.13) két-fonon Green-függvény szoros kapcsolatban áll a

$$G_{pp',k'}^{(2)}(t-t') = \langle\langle B_p(t) A_{p'}(t); A_{k'}^+(t') \rangle\rangle \quad (2.5.14)$$

és a

$$G_{pp',k'}^{(3)}(t-t') = \langle\langle B_p(t) B_{p'}(t); A_{k'}^+(t') \rangle\rangle \quad (2.5.15)$$

két-fonon Green-függvényekkel, ezért a három két-fonon Green-függvény mozgásegyenletét együttesen kell felírni. Differenciálva a (2.5.13)–(2.5.14) két-fonon Green-függvényeket a t időargumentum szerint, egy egyenletrendszert kapunk, amelynek a jobb oldalán három-fonon és további, magasabb rendű Green-függvények is fellépnek. Itt újra a szétkapcsolás módszerét alkalmazzuk, hasonlóan mint a (2.5.4) egyenlet megoldásakor:

$$\begin{aligned} \langle\langle C_p A_{k_1} \dots A_{k_n}; A_{k'}^+ \rangle\rangle &\approx \sum_{i=1}^n \langle\langle C_p A_{k_i}; A_{k'}^+ \rangle\rangle \left\langle \prod_{j \neq i}^n A_{k_j} \right\rangle + \\ &+ \sum_{i=1}^n \langle\langle A_{k_i}; A_{k'}^+ \rangle\rangle \sum_{j \neq i}^n \langle C_p A_{k_j} \rangle \left\langle \prod_{l \neq i,j}^n A_{k_l} \right\rangle \end{aligned} \quad (2.5.16)$$

ahol a C_p operátor az A_p , illetve a B_p operátorral egyenlő. Megjegyezzük, hogy a (2.5.16) egyenlőség második sorában további szétkapcsolást alkalmaztunk a C_p operátort tartalmazó korrelációs függvények vonatkozásában. Az alkalmazott szétkapcsolási eljárások lehetővé teszik, hogy a (2.5.1) Green-függvény tömegoperátorát

a három-fonon szórási folyamatok figyelembevételével számítsuk ki, a (2.5.16) szétkapcsolás első tagjának a figyelembevétele azonban lehetővé teszi, hogy a fononok frekvenciáját pszeudoharmonikus közelítésben számítsuk ki.

Dolgozatunkban tehát kiindulási közelítésül a pszeudoharmonikus közelítést használjuk, és a Green-függvény tömegoperátorát a három-fonon szórási folyamatok figyelembevételével számítjuk ki. Megjegyezzük, hogy ezt az utat követtük a [72] és [73] dolgozatainkban is, míg a [71] dolgozatban a (2.5.16) szétkapcsolás első tagját nem vettük számításba, és kiindulási közelítésül a harmonikus közelítést választottuk. A pszeudoharmonikus közelítés kiindulási közelítésként való megválasztása indokolt és következetes eljárás, egyben a számítások lényeges egyszerűsödésére is vezet, ezért a [71] dolgozat kivételével később már mindenütt ezt a megválasztást alkalmaztuk.

A (2.5.13)–(2.5.15) Green-függvények Fourier-transzformáltjaira vonatkozó egyenleteket (2.5.7), (2.5.8), (2.5.11) és (2.5.16) figyelembevételével

$$\begin{aligned} \omega G_{pp',k'}^{(1)}(\omega) &= \omega_p G_{pp',k'}^{(2)}(\omega) + \omega_{p'} G_{p'p,k'}^{(2)}(\omega) \\ \omega G_{pp',k'}^{(2)}(\omega) &= \omega_{p'} G_{pp',k'}^{(3)}(\omega) + \omega_p G_{p'p,k'}^{(1)}(\omega) + \\ &\quad + \langle A_p^+ A_p \rangle 2 \sum_{p_1} \tilde{V}_3(-p, -p', p_1) G_{p_1 k'}(\omega) \\ \omega G_{pp',k'}^{(3)}(\omega) &= \omega_p G_{p'p,k'}^{(2)}(\omega) + \omega_{p'} G_{pp',k'}^{(2)}(\omega) + \\ &\quad + \{ \langle A_p^+ B_{p'} \rangle + \langle B_p A_p^+ \rangle \} 2 \sum_{p_1} \tilde{V}_3(-p, p', p_1) G_{p_1 k'}(\omega) \end{aligned} \quad (2.5.17)$$

alakban írhatjuk fel. Megjegyezzük, hogy a (2.5.17) egyenletrendszer csupán abban különbözik a [71] dolgozatban nyert analóg egyenletrendszertől, hogy a (2.5.17) egyenletrendszerben az ω_p frekvenciák a fononok pszeudoharmonikus közelítésben számított frekvenciái, és nem a harmonikus közelítésben számított fonon frekvenciák, mint a [71] dolgozatban.

A (2.5.17) egyenletrendszer megoldását

$$G_{pp',k'}^{(1)}(\omega) = 2F(p, p', \omega) \sum_{p_1} \tilde{V}_3(-p, -p', p_1) G_{p_1 k'}(\omega) \quad (2.5.18)$$

alakban írhatjuk fel, ahol

$$F(p, p', \omega) = \frac{N_p + N_{p'}}{2} \frac{\omega_p + \omega_{p'}}{\omega^2 - (\omega_p + \omega_{p'})^2} - \frac{N_p - N_{p'}}{2} \frac{\omega_p - \omega_{p'}}{\omega^2 - (\omega_p - \omega_{p'})^2} \quad (2.5.19)$$

és $N_p = \langle A_p^+ A_p \rangle$. Megjegyezzük, hogy a (2.2.38) összegszabály következtében $\tilde{N}_p = \langle A_p^+ B_p \rangle = -1$ és így ezeket a korrelációs függvényeket tartalmazó tag $\tilde{N}_p + \tilde{N}_{p'} + +2 = 0$.

A (2.5.12) egyenletet tehát (2.5.19) felhasználásával

$$\begin{aligned} (\omega^2 - \omega_k^2) G_{kk'}(\omega) &= 2\omega_k \delta_{kk'} + \\ &\quad + 2\omega_k \sum_{p, p', k_1} F(p, p', \omega) \tilde{V}_3(-k, p, p') \tilde{V}_3(-p, -p', k_1) G_{k_1 k'}(\omega) \end{aligned} \quad (2.5.20)$$

alakban írhatjuk fel, amelyet, bevezetve a $\Pi_{kk_1}(\omega)$ tömegoperátort a

$$\Pi_{kk_1}(\omega) = \sum_{pp'} \tilde{V}_3(-k, p, p') \tilde{V}_3(-p, -p', k_1) F(p, p', \omega) \quad (2.5.21)$$

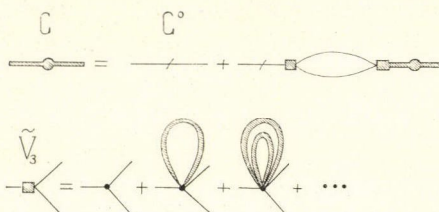
kifejezéssel, Dyson-egyenlet alakjában is felírhatunk

$$G_{kk'}(\omega) = G_k^0(\omega)\delta_{kk'} + G_k^0(\omega) \sum_{k_1} \Pi_{kk_1}(\omega) G_{k_1k'}(\omega) \quad (2.5.22)$$

ahol a

$$G_k^0(\omega) = \frac{2\omega_k}{\omega^2 - \omega_k^2} \quad (2.5.23)$$

Green-függvény a pszeudoharmonikus közelítésben meghatározott Green-függvény. A tömegoperátor kifejezésében szereplő \tilde{V}_3 függvény kiszámításánál az átlagos potenciális energiát elegendő pszeudoharmonikus közelítésben számításba venni, ekkor



2.4 ábra. Az egy-fonon Green-függvény egyenletének sematikus ábrázolása az effektív köbös közelítésben

(2.3.26) és (2.5.8) figyelembevételével mondhatjuk, hogy a tömegoperátor csak a párkorrelációs függvényeknek a függvénye, amelyeket viszont a (2.5.22) egyenletből meghatározható egy-fonon Green-függvények segítségével kiszámíthatunk. Ezt a közelítést alkalmazva a (2.5.22) egyenlet valóban zárttá vált.

A 2.4 ábrán az egy-fonon Green-függvény (2.5.22) egyenletét ábrázoltuk sematikusán. Az ábra felső sorában fekete

négyzettel ábrázolt \tilde{V}_3 renormált vertex függvényt a fent megfogalmazott közelítésben, amelyet effektív köbös közelítésnek nevezünk, az ábra második sorában ábrázoltuk sematikusán. A párkorrelációs függvények vastag vonalú ábrázolása azt kívánja szemléltetni, hogy a párkorrelációs függvényeket a $G_{kk'}(\omega)$ Green-függvény felhasználásával és nem a $G_k^0(\omega)$ pszeudoharmonikus Green-függvény felhasználásával számítjuk ki. Megjegyezzük, hogy ebben különbözik elméletünk a [99]–[101] dolgozatokban kifejtett elmélettől, ahol ugyanis a párkorrelációs függvényeket a $G_k^0(\omega)$ Green-függvény segítségével számítják ki. Az általunk alkalmazott eljárás a self-consistens tárgyalásmódot következtetesebben biztosítja.

A (2.5.22) egyenlet megoldását

$$G_{kk}(\omega) = G_{\bar{k}j}(\omega) = \frac{2\omega_{kj}}{\omega^2 - \omega_{\bar{k}j}^2 - 2\omega_{\bar{k}j}\Pi_{\bar{k}j}(\omega)} \quad (2.5.24)$$

alakban írhatjuk fel, ahol a $\Pi_{\bar{k}j}(\omega)$ tömegoperátort a

$$\Pi_k(\omega) = \sum_{p, p'} |\tilde{V}_3(-k, p, p')|^2 F(p, p', \omega) \quad (2.5.25)$$

kifejezés adja meg. Megjegyezzük, hogy az általunk tárgyalt problémák vizsgálata esetében a $\Pi_{kk_1}(\omega)$ tömegoperátor diagonális és így (2.5.24) formulára jutunk. Az optikai jelenségek vizsgálatánál például, amellyel azonban dolgozatunk nem foglalkozik, a tömegoperátor nem diagonális és így a (2.5.22) egyenlet megoldása bonyolultabb alakban írható csak fel [149]–[151].

A (2.5.25) tömegoperátor kifejezésében szereplő párkorrelációs függvényeket a (2.5.24) egy-fonon Green-függvény felhasználásával

$$\begin{aligned} N_k &= \langle A_k^+ A_k \rangle = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega (e^{\omega/\theta} - 1)^{-1} [-\text{Im } G_k(\omega + i\delta)] = \\ &= \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} d\omega \coth(\omega/2\theta) [-\text{Im } G_k(\omega + i\delta)] \end{aligned} \quad (2.5.26)$$

alakban írhatjuk fel.

A (2.5.24) Green-függvény pólusai határozzák meg az elemi gerjesztések, a self-consistens fononok frekvenciaspektrumát

$$\epsilon_{\bar{k}j} = \omega_{\bar{k}j} + \text{Re } \Pi_{\bar{k}j}(\epsilon_{\bar{k}j}) \quad (2.5.27)$$

A (2.5.25) tömegoperátor képzetes része a fononok csillapodását adja meg, vagyis a félérték-szélességet

$$\Gamma_{\bar{k}j}(\epsilon_{\bar{k}j}) = -\text{Im } \Pi_{\bar{k}j}(\epsilon_{\bar{k}j} + i\delta) \quad (2.5.28)$$

Így a kristályrács rezgéseinek frekvencia-eloszlási függvényét adott \bar{k} kváziimpulzus mellett a

$$g_{\bar{k}j}(\omega) = -\frac{1}{2\pi} \frac{1}{\omega_{\bar{k}j}} \text{Im } G_{\bar{k}j}(\omega + i\delta) = \frac{1}{\pi} \frac{2\omega_{\bar{k}j} \Gamma_{\bar{k}j}(\omega)}{[\omega^2 - \epsilon_{\bar{k}j}^2]^2 + [2\omega_{\bar{k}j} \Gamma_{\bar{k}j}(\omega)]^2} \quad (2.5.29)$$

kifejezés határozza meg, amelyből leolvashatjuk, hogy e függvénynek véges szélességű maximuma van ellentétben a pszeudoharmonikus közelítéssel, amikor is ez a maximum, mint azt a (2.5.23) Green-függvényből is leolvashatjuk, δ -függvény alakúnak adódik. Az eloszlás-függvény maximumának a helye és szélessége meghatározza a fononok frekvenciáját és reciprok élettartamát a $\{\bar{k}j\}$ mennyiségek függvényében. Mint már hivatkoztunk rá, a koherens rugalmatlan neutronszerelési kísérletekkel meghatározható a fononok frekvenciája és reciprok élettartama. Megjegyezzük, hogy a tárgyalat közelítésben elvégzett numerikus számítások eredményei [100], [101] a neon és argon kristályok esetében jól megegyeznek a kísérleti adatokkal.

A kristály egyensúlyi paramétereit a kristály (2.3.35) állapotegyenlete határozza meg. Az állapotegyenletben a kristály potenciális energiájának az átlagos értékét a pszeudoharmonikus közelítésben számíthatjuk ki, vagyis az állapotegyenletet közelítőleg

$$P = -\frac{1}{3V} \sum_{l,\alpha} l_\alpha \nabla_l^2 \tilde{U}(\bar{l}_1, \dots, \bar{l}_N) \quad (2.5.30)$$

alakban írhatjuk fel, ahol az $\tilde{U}(\bar{l}_1, \dots, \bar{l}_N)$ függvényt a (2.3.26) összefüggéssel határoztuk meg.

A kristály termodinamikai jellemzőit a szabadenergia, illetve a belső energia kifejezéseinek a felhasználásával számíthatjuk ki. Felírjuk ezeket a mennyiségeket is

az effektív köbös közelítésben. A belső energia (2.3.28) kifejezését esetünkben célszerű

$$E = \langle H \rangle = U_0(\tilde{l}_1, \dots, \tilde{l}_N) + \tilde{U}(\tilde{l}_1, \dots, \tilde{l}_N) + \\ + \frac{1}{\pi} \int_0^\infty d\omega \coth(\omega/2\theta) \sum_k \frac{\omega^2}{4\omega_k} [-\operatorname{Im} G_k(\omega + i\delta)] + 2\tilde{F}_3(\theta) \quad (2.5.31)$$

alakban felírni, ahol bevezettük az $\tilde{F}_3(\theta)$ függvényt, amelyet az

$$\tilde{F}_3(\theta) = \frac{1}{12} \sum_k \omega_k \{ \langle B_k^+ B_k \rangle - \langle A_k^+ A_k \rangle \} = \\ = \frac{1}{6\pi} \int_0^\infty d\omega \coth(\omega/2\theta) \sum_k \frac{\omega^2 - \omega_k^2}{2\omega_k} [-\operatorname{Im} G_k(\omega + i\delta)] = \\ = \frac{1}{6\pi} \int_0^\infty d\omega \coth(\omega/2\theta) \sum_k \{ -\operatorname{Re} \Pi_k(\omega) \operatorname{Im} G_k(\omega + i\delta) - \operatorname{Im} \Pi_k(\omega + i\delta) \operatorname{Re} G_k(\omega) \} \quad (2.5.32)$$

összefüggéssel határoztunk meg. *Plakida* kimutatta [91], hogy az $\tilde{F}_3(\theta)$ függvény az effektív köbös közelítés járuléka a szabadenergia kifejezéséhez. A (2.5.32) kifejezésben a $G_k(\omega) \approx G_k^0(\omega)$ közelítést alkalmazva és figyelembe véve a $\Pi_k(\omega)$ tömegoperátor explicit alakját, az $\tilde{F}_3(\theta)$ függvényt

$$\tilde{F}_3(\theta) = -\frac{1}{6} \sum_{k,p,p'} |\tilde{V}_3(k,p,p')|^2 \left\{ \frac{(1+n_p)(1+n_{p'})(1+n_k) - n_p n_{p'} n_k}{\omega_p + \omega_{p'} + \omega_k} + \right. \\ \left. + \frac{n_k(1+n_p+n_{p'}) - n_p n_{p'}}{\omega_p + \omega_{p'} - \omega_k} \right\} \quad (2.5.33)$$

alakban is felírhatjuk, ahol az

$$N_p = \langle A_p^+ A_p \rangle \approx \coth(\omega_p/2\theta) \equiv 2n_p + 1 \quad (2.5.34)$$

összefüggés alapján bevezettük az n_p mennyiségeket, amelyeket a

$$n_p = [\exp(\omega_p/\theta) - 1]^{-1} \quad (2.5.35)$$

egyenlőséggel is definiálhatunk. Megjegyezzük, hogy a (2.5.33) kifejezés megegyezik a perturbáció-számítás felhasználásával előállított analóg kifejezéssel [140]–[142], ha (2.5.33)-ban nem vesszük figyelembe a pszeudoharmonikus renormálást. (Lásd ezzel kapcsolatban a [99], [100] dolgozatokat is.)

A vizsgált közelítésben most már könnyen felírhatjuk (2.4.14) figyelembevételével a szabadenergia kifejezését

$$F = F_{ps} + \tilde{F}_3(\theta) = \theta \sum_{kj} \ln \sinh(\omega_{kj}/2\theta) + \\ + \tilde{U}(\tilde{l}_1, \dots, \tilde{l}_N) - \frac{1}{4} \sum_{kj} \omega_{kj} \coth(\omega_{kj}/2\theta) + \tilde{F}_3(\theta) \quad (2.5.36)$$

alakban.

Foglaljuk most össze eredményeinket. Az effektív köbös közelítésben felírtuk a (2.5.10), (2.5.24)—(2.5.26), (2.5.30) egyenletekből álló self-consistens egyenletrendszert. Az egyenletrendszer megoldásai a megadott külső feltételek mellett (θ , P , illetve θ , V) egyértelműen meghatározzák a kristály dinamikai, termikus és rugalmas tulajdonságait. A megoldások ismeretében ugyanis a (2.5.30) egyenlet felhasználásával ki tudjuk számítani a kristály egyensúlyi paramétereit vagyis a kristály térfogatát, mint a hőmérséklet függvényét állandó nyomás esetében, illetve a felépő nyomást, mint a hőmérséklet függvényét állandó térfogat esetében; a (2.5.27) és (2.5.28) egyenletek felhasználásával kiszámíthatjuk az elemi gerjesztések, a self-consistens fononok frekvenciáját és félérték-szélességét, a (2.5.31), (2.5.33) és (2.5.36) formulák segítségével pedig a kristály belső energiáját és szabadenergiáját számíthatjuk ki. A kiszámított mennyiségek felhasználásával a statisztikus mechanika, illetve a termodinamika általános összefüggései segítségével számos más mennyiséget (pl. fajhő, hőtágulási együttható, rugalmas állandók stb.) származtathatunk le, vagyis a fentiek alapján az adott közelítésben kiszámíthatjuk a kristály fizikai tulajdonságait jellemző legfontosabb mennyiségeket.

A fentebb felírt self-consistens egyenletrendszert a (2.3.26) self-consistens potenciál — ami nem más, mint a kristály átlagos potenciális energiája a pszeudoharmonikus közelítésben — teszi meghatározottá. A self-consistens potenciál kiszámításához ismernünk kell a kristályrács atomjainak kölcsönhatási potenciálját. A kölcsönhatási potenciál ismeretében a számítások konkrét formában keresztülvihetők, és így a kristály tulajdonságait elméletileg tanulmányozhatjuk.

Evvel a feladattal fogunk részletesen foglalkozni dolgozatunk 4. fejezetében, amikor is a közvetlenül szomszédos atomok centrális párkölcsönhatását feltételezve egy lapcentrált köbös kristályrács tulajdonságainak kiszámítására fogjuk alkalmazni a fentiekben kidolgozott self-consistens elméletet, és e példán bemutatjuk, hogy az elmélet milyen új fizikai eredményekre vezet.

Megjegyezzük, hogy az anharmonikus kristályok self-consistens elméletének egy másik, a fentivel ekvivalens változata alapján numerikusan kiszámították egyrészt a Ne, Ar, Kr és Xe nemesgáz kristályok, másrészt a He^3 és He^4 kvantumkristályok tulajdonságait jellemző mennyiségeket [70], [99]—[108], [110]—[112], [115], [117]. A kísérleti adatok és az elméleti eredmények összehasonlítása alapján megállapíthatjuk, hogy az anharmonikus kristály self-consistens elmélete az effektív köbös közelítésben a kristály tulajdonságainak meglehetősen jó leírását adja a kristály létezésének teljes hőmérsékleti tartományában.

Technikai szerkesztő: Turchányi György
A kiadásért felel az Akadémiai Kiadó igazgatója – Műszaki szerkesztő: Helle Mária
A kézirat beérkezett: 1972. VI. 26. – Terjedelem: 8,4 (A/5) ív
72-1954 – Szegedi Nyomda

**A MAGYAR
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
MATEMATIKAI ÉS FIZIKAI TUDOMÁNYOK
OSZTÁLYÁNAK**

KÖZLEMÉNYEI

Matematikai, fizikai, csillagászati dolgozatokat, referátumokat, könyvismertetéseket, a Tudományos Minősítő Bizottságnak a III. Osztályra vonatkozó híreit s a III. Osztály híreit közli. Évenként egy kötet (kb. 40 ív) jelenik meg (négy szám alkot egy kötetet).

A Közlemények előfizetési ára kötetenként, azaz évenként 60 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, Budapest V., Alkotmány u. 21. Pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11 488, külföldi megrendelések a „Kultúra”

Könyv- és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat,

Budapest I., Fő utca 32.

(Pénzforgalmi jelzőszám: 218-10 990 útján eszközölhetők.)

Ára: 10,— Ft
Előfizetés kötetenként: 48,— Ft

INDEX: 26 491

TARTALOMJEGYZÉK

	oldal
<i>Fodor Ilona</i> : Izobár analóg állapotok gamma-bomlásának vizsgálata az $A > 40$ tömegszám tartományban	431
<i>Siklós Tivadar</i> : Az anharmonikus kristályok self-consistens elmélete I.....	485

307.226

2
**MAGYAR
FIZIKAI FOLYÓIRAT**

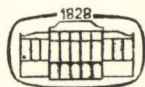
**A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI**

**KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR,
PÁL LÉNÁRD ÉS SZALAY SÁNDOR
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL**

**SZERKESZTI
JÁNOSSY LAJOS**

XX. KÖTET

6. FÜZET



**AKADÉMIAI KIADÓ
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
BUDAPEST 1972**

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA III. OSZTÁLYÁNAK

FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: BUDAPEST V., ALKOTMÁNY UTCA 21. SZ.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása, elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A klasszikus irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikkeket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10—10 dolgozat megjelenése után a folyóiratfüzetekről leválasztva, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóiratból évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 iv terjedelemben.

A kéziratok a következő címre küldendők:

Jánossy Lajos akadémikus
Budapest XII. Konkoly Thege út
Központi Fizikai Kutató Intézet

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött, el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként 48 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, Budapest V., Alkotmány utca 21. (pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11 488), külföldi megrendelések a „Kultúra” Könyv- és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat, Budapest I., Fő utca 32. (pénzforgalmi jelzőszám: 218-10 990) útján eszközölhetők.

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmi ismertetőt írjanak.
2. A levezetéseknek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közöljék. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázószöveget írjanak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.

MAGYAR
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
KÖNYVTÁRA

AZ ANHARMONIKUS KRISTÁLYOK SELF-CONSISTENS ELMÉLETE. II.*

SIKLÓS TIVADAR

Egyesített Atomkutató Intézet, Elméleti Fizikai Laboratórium, Dubna;
MTA Központi Fizikai Kutató Intézet, Budapest

3. Az anharmonikus lineáris lánc

Az anharmonikus kristályoknak dolgozatunk második fejezetében kidolgozott self-consistens elméletét ebben a fejezetben egy egyszerű modell: a lineáris lánc tulajdonságainak a vizsgálatára fogjuk alkalmazni. Jóllehet ez a modell meglehetősen távol áll a reális, háromdimenziós kristályoktól, és az e modellre nyert eredményeknek a háromdimenziós esetre való általánosításakor kellő óvatossággal kell eljár-nunk [7], mégis érdemes elméletünket először erre a modellre alkalmazni, mert ebben az esetben számításaink lényegesen leegyszerűsödnek, könnyebben áttekinthetők, mint egy, a reálshoz közelebb álló kristálymodell vizsgálata esetében. Megjegyezzük egyben, hogy az anharmonikus lineáris lánc tulajdonságait részletesen tanulmányozták a perturbációszámítás szokásos módszereinek a felhasználásával is [7], [8], [24], [140], [142], így lehetőségünk nyílik az általunk kidolgozott self-consistens elmélet alapján, illetve a perturbációszámítás szokásos módszerei felhasználásával kapott eredmények összehasonlítására.

Az anharmonikus lineáris lánc tulajdonságait először a pszeudoharmonikus közelítésben fogjuk tanulmányozni, ugyanis ez a közelítés, mint láttuk, további egyszerűsítéseket enged meg a számításokban, és így a kidolgozott elmélet alapvető vonásait jobban, áttekinthetőbben feltárja. Éppen ezért a lineáris lánc esetében a pszeudoharmonikus közelítést elég részletesen fogjuk tárgyalni. A lineáris lánc tulajdonságait kétféle külső feltétel megadása mellett fogjuk vizsgálni: az egyik esetben a lineáris lánc hosszát tekintjük rögzítettnek, a másik esetben a lánc végeire alkalmazott nyomást tartjuk állandó értékűnek. Mint azt látni fogjuk, ha az állandó külső nyomást megfelelően kis értékűnek választjuk meg, eredményeinket analitikus alakban is előállíthatjuk.

A pszeudoharmonikus közelítésben elvégzett számítások kifejtése után a lineáris lánc tulajdonságait a self-consistens fononok csillapodására vezető legegyszerűbb három-fonon rugalmatlan szórási folyamatok figyelembevételével fogjuk vizsgálni a fentebb említett két külső feltétel megadása mellett.

MAGYAR
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
KÖNYVTÁRA

* Doktori értekezés. Az I. rész a Magyar Fizikai Folyóirat előző számában jelent meg.

A.

Az anharmonikus lineáris lánc elmélete a pszeudoharmonikus közelítésben

3.1 A self-consistens egyenletrendszer

Tekintsünk egy $N+1$ egyfajtájú, M tömegű atomból álló L hosszúságú lineáris láncot. Ha a lineáris láncban csak a közvetlenül szomszédos atomok kölcsönhatását vesszük figyelembe, akkor adiabatikus közelítésben a vizsgált rendszer Hamilton-operátorát

$$\mathcal{H} = H + H_1 = \sum_{n=0}^N \frac{P_n^2}{2M} + \frac{1}{2} \sum_{n=1}^N \varphi(R_n - R_{n-1}) + H_1 \quad (3.1.1)$$

alakban írhatjuk fel, ahol P_n és R_n az n -edik atom impulzus-, illetve koordináta-operátora, $\varphi(R_n - R_{n-1})$ a közvetlenül szomszédos atomok közötti kölcsönhatási potenciál adiabatikus közelítésben. A lineáris láncot deformáló külső erők hatását a H_1 Hamilton-operátor írja le, amelyet a lineáris lánc esetében

$$H_1 = P(R_N - R_0) = P \sum_{n=1}^N (R_n - R_{n-1}) \quad (3.1.2)$$

alakban írhatunk fel, ahol P a lineáris lánc végeire ható nyomás.

Bevezetjük a szomszédos atomok l egyensúlyi távolságát és a szomszédos atomoknak az egyensúlyi helyzetükből való relatív elmozdulásának operátorait az

$$R_n - R_{n-1} = \langle R_n - R_{n-1} \rangle + u_n - u_{n-1} \equiv l + u_n - u_{n-1} \quad (3.1.3)$$

defináló egyenlet segítségével, ahol a rendszer egyensúlyi helyzetére vonatkoztatott statisztikai átlagértékképzést az (1.1.4) formulával megadott módon, a (3.1.1) Hamilton-operátorral végezzük el.

Írjuk fel a lineáris lánc állapotegyenletét, amely összefüggést állapít meg a P nyomás és az atomok l egyensúlyi távolsága között. Mint a 2.3. pontban általános esetben láttuk, az állapotegyenletet a legegyszerűbben abból a feltételből kiindulva vezethetjük le, hogy az egyensúlyi állapotban bármelyik atom átlagos gyorsulása zérussal egyenlő, vagyis fennáll az

$$i \frac{\partial}{\partial t} \langle i P_n(t) \rangle = \langle [i P_n, \mathcal{H}] \rangle = 0 \quad (3.1.4)$$

összefüggés, amelyből felhasználva a (3.1.1) és a (3.1.2) kifejezéseket, a lineáris lánc állapotegyenletét

$$P = -\frac{1}{2} \left\langle \frac{\partial}{\partial R_n} \varphi(R_n - R_{n-1}) \right\rangle = -\frac{1}{2} \langle \varphi'(l) \rangle \quad (3.1.5)$$

alakban nyerjük. A (3.1.4) formulában $P_n(t)$ az n -edik atom impulzus-operátorát jelöli Heisenberg-reprezentációban. A

$$\varphi(R) = \sum_q \varphi(q) e^{iqR}; \quad \varphi(q) = \frac{1}{L} \int_{-\frac{L}{2}}^{+\frac{L}{2}} dR \varphi(R) e^{-iqR} \quad (3.1.6)$$

Fourier-transzformáció felhasználásával könnyen bevezethetjük a lineáris lánc Hamilton-operátorának (3.1.1) kifejezésébe az egyensúlyi helyzetből való elmozdulás operátorait. Ebben a reprezentációban a (3.1.1) Hamilton-operátort

$$\mathcal{H} = \sum_n \frac{P_n^2}{2M} + \frac{1}{2} \sum_n \sum_q \varphi(q) e^{iq} e^{iq(u_n - u_{n-1})} + H_1 \quad (3.1.7)$$

alakban írhatjuk fel. Mint látni fogjuk, a pszeudoharmonikus közelítés alkalmazásakor a lineáris lánc Hamilton-operátorának (3.1.7) alakját bizonyul célszerűnek felhasználni számításaink során.

Írjuk most fel a dolgozatunk 2. fejezetében definiált

$$G_{nn'}(t-t') = \langle\langle u_n(t); u_{n'}(t') \rangle\rangle \quad (3.1.8)$$

retardált termodinamikai Green-függvény mozgásegyenletét a lineáris lánc (3.1.7) Hamilton-operátorának felhasználásával:

$$Mi^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} G_{nn'}(t-t') = \delta(t-t') \delta_{nn'} + \\ + \frac{1}{2} \sum_q \varphi(q) e^{iq} iq \langle\langle \{e^{iq(u_n - u_{n-1})} - e^{iq(u_{n+1} - u_n)}\}; u_{n'}(t') \rangle\rangle \quad (3.1.9)$$

Mint láthatjuk, a (3.1.9) egyenlet jobb oldalán fellép az

$$\langle\langle e^{iq(u_n - u_{n-1})}; u_{n'} \rangle\rangle = \sum_{s=1}^{\infty} \frac{1}{s!} \langle\langle \{iq(u_n - u_{n-1})\}^s; u_{n'} \rangle\rangle \quad (3.1.10)$$

több-fonon folyamatokat leíró Green-függvény. Alkalmazzuk most dolgozatunk 2.4. pontjában kifejtett pszeudoharmonikus közelítést, vagyis egy olyan szétkapcsolási eljárást a sok-fonon Green-függvények vonatkozásában, amikor azokat közelítőleg csak az egy-fonon Green-függvények felhasználásával állítjuk elő:

$$\langle\langle e^{iq(u_n - u_{n-1})}; u_{n'} \rangle\rangle = \sum_{s=1}^{\infty} \frac{1}{s!} \langle\langle \{iq(u_n - u_{n-1})\}^s; u_{n'} \rangle\rangle \approx \\ \approx \sum_{s=1}^{\infty} \frac{1}{s!} \langle\langle \{iq(u_n - u_{n-1})\}^{s-1} \rangle_s \langle\langle iq(u_n - u_{n-1}); u_{n'} \rangle\rangle = \\ = \langle\langle e^{iq(u_n - u_{n-1})} \rangle iq \langle\langle (u_n - u_{n-1}); u_{n'} \rangle\rangle \quad (3.1.11)$$

A (3.1.11) előállítás jobb oldalán fellépő korrelációs függvényekre ugyanezt a közelítést kell alkalmaznunk, hogy a (3.1.11) előállítás zárttá váljon. E számítás keresztülviteléhez célszerű bevezetnünk az

$$F(\lambda) = \langle\langle e^{\lambda q(u_n - u_{n-1})} \rangle\rangle; \quad F(0) = 1 \quad (3.1.12)$$

függvényt. Differenciáljuk a bevezetett (3.1.12) függvényt a λ paraméter szerint, és alkalmazzuk a (3.1.11) típusú közelítést

$$\frac{\partial F(\lambda)}{\partial \lambda} = \langle\langle q(u_n - u_{n-1}) e^{\lambda q(u_n - u_{n-1})} \rangle\rangle = \\ = \left\langle q(u_n - u_{n-1}) \sum_{s=1}^{\infty} \frac{(q\lambda)^s}{s!} (u_n - u_{n-1})^s \right\rangle \approx \lambda q^2 \langle\langle (u_n - u_{n-1})^2 \rangle\rangle F(\lambda) \quad (3.1.13)$$

A (3.1.13) egyenlőséget integrálva a λ paraméter szerint a $\lambda=0$ és a $\lambda=i$ integrációs határok között az

$$\langle e^{iq(u_n - u_{n-1})} \rangle = e^{-1/2 q^2 \langle (u_n - u_{n-1})^2 \rangle} = e^{-1/2 q^2 \bar{u}^2} \quad (3.1.14)$$

kifejezést nyerjük, ahol figyelembe vettük, hogy a szomszédos atomok viszonylagos elmozdulásának négyzetes középértéke nem függ az n indextől

$$\bar{u}^2 = \langle (u_{n+1} - u_n)^2 \rangle = \langle (u_n - u_{n-1})^2 \rangle. \quad (3.1.15)$$

Vezessük be a (3.1.8) Green-függvény idő szerinti Fourier-transzformáltját

$$G_{nn'}(t-t') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega(t-t')} G_{nn'}(\omega) \quad (3.1.16)$$

formula alapján. Figyelembe véve, hogy ha a határeffektusokat nem vesszük számításba, a $G_{nn'}(\omega)$ Green-függvény csak az $(n-n')$ különbségtől függ, és maguktól az n indexektől nem függ, írhatjuk

$$G_{nn'}(\omega) = \frac{1}{MN} \sum_k e^{ikl(n-n')} G_k(\omega). \quad (3.1.17)$$

Így felhasználva a (3.1.11) és a (3.1.12) kifejezéseket az egy-fonon Green-függvényre az

$$\omega^2 G_k(\omega) = 1 + \frac{1}{2M} \sum_q \varphi(q) e^{iq l} (iq)^2 e^{-1/2 q^2 \bar{u}^2} 2(1 - \cos kl) G_k(\omega) \quad (3.1.18)$$

egyenletet nyerjük a pszeudoharmonikus közelítésben. A (3.1.18) egyenlet megoldását

$$G_k(\omega) = \frac{1}{\omega^2 - \omega_k^2} \quad (3.1.19)$$

alakban írhatjuk fel. A (3.1.19) megoldás ugyanolyan alakú, mint a harmonikus közelítésben nyerhető megoldás, azonban a (3.1.19) kifejezésben a frekvencia renormált:

$$\omega_k^2 = \frac{4f(\theta, l)}{M} \sin^2 \frac{kl}{2} = \frac{f(\theta, l)}{f} \omega_{0k}^2 \equiv \alpha^2 \omega_{0k}^2, \quad (3.1.20)$$

ahol ω_{0k} a rácsrezgések harmonikus frekvenciája, f a harmonikus erő-állandó $P=0$ esetében. Érdeemes megjegyeznünk, hogy a frekvencia pszeudoharmonikus renormálási tényezője k -től nem függ. A $f(\theta, l)$ pszeudoharmonikus erőállandót a (3.1.18) egyenletnek megfelelően

$$f(\theta, l) = \frac{1}{2} \sum_q \varphi(q) e^{iq l} (iq)^2 e^{-1/2 q^2 \bar{u}^2} = \frac{1}{2} \tilde{\varphi}''(l) \quad (3.1.21)$$

alakban írhatjuk fel, ahol bevezettük a self-consistens potenciált a

$$\langle \varphi(R_n - R_{n-1}) \rangle \approx \tilde{\varphi}(l) = \sum_q \varphi(q) e^{iq l} e^{-1/2 q^2 \bar{u}^2} = \sum_{s=0}^{\infty} \frac{1}{s!} \left(\frac{\bar{u}^2}{2} \right)^s \varphi^{(2s)}(l) \quad (3.1.22)$$

kifejezéssel. Mint dolgozatunk 2. fejezetében láttuk, a self-consistens potenciál nem más, mint a kristály átlagos potenciális energiája a pszeudoharmonikus közelítésben.

Megjegyezzük, hogy a (3.1.22) kifejezés levezetésekor az $\exp(-1/2 \cdot q^2 \bar{u}^2)$ függvényt \bar{u}^2 szerint sorba fejtettük és a q változó szerint integráltunk. A self-consistens potenciált felírhatjuk még

$$\tilde{\varphi}(l) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{x^2}{2}} \varphi(l + x\sqrt{\bar{u}^2}) \quad (3.1.23)$$

alakban is, ahol $x = R/\sqrt{\bar{u}^2}$. Mint a (3.1.23) kifejezésből látható, a kölcsönhatási potenciált az $R \sim \sqrt{\bar{u}^2} \ll l$ kis tartományra átlagoljuk a fononok self-consistens terét figyelembe vevő $\exp(-x^2/2)$ Gauss-függvénnyel. Így a (3.1.23) integrálhoz lényeges járulékot a $\varphi(R)$ kölcsönhatási potenciál-függvénynek csak a minimumhely körüli része ad.

A (3.1.19) Green-függvény ismeretében könnyen felírhatjuk az $\langle u_{n'} u_n \rangle$ korrelációs függvényt

$$\langle u_{n'} u_n \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega (e^{i\omega\theta} - 1)^{-1} \{-2 \operatorname{Im} G_{nn'}(\omega + i\delta)\}, \quad (3.1.24)$$

és ekkor a self-consistens potenciál (3.1.22) kifejezésében szereplő \bar{u}^2 korrelációs függvényre (3.1.19) felhasználásával az

$$\begin{aligned} \bar{u}^2 &= \langle (u_n - u_{n-1})^2 \rangle = \frac{1}{Nf} \sum_k \frac{\omega_{0k}^2}{2\omega_k} \coth(\omega_k/2\theta) = \\ &= \frac{\omega_{0L}}{\pi f} \frac{1}{\alpha} \int_0^{\pi/2} d\varphi \sin \varphi \coth\left(\frac{\omega_{0L}}{2\theta} \alpha \sin \varphi\right) \end{aligned} \quad (3.1.25)$$

kifejezést nyerjük, ahol az egyenlőség második sorában a k szerinti összegezésről áttértünk a $\varphi = kl/2$ változó szerinti integrálásra. Itt $\omega_{0L} = (4f/M)^{1/2}$ jelöli a lineáris lánc maximális rezgési frekvenciáját harmonikus közelítésben, $\tau = \theta/\omega_{0L}$ a dimenzió nélküli hőmérséklet.

A lineáris lánc tulajdonságait a θ hőmérsékleten kívül a lineáris lánc rögzített hossza $L = Nl$, vagy a P külső nyomás determinálja. Ezek a mennyiségek a lineáris lánc (3.1.5) állapotegyenletének tesznek eleget, amelyet a self-consistens potenciál (3.1.22) kifejezésének a figyelembevételével

$$P = -\frac{1}{2} \langle \varphi'(R_n - R_{n-1}) \rangle = -\frac{1}{2} \tilde{\varphi}'(l) \quad (3.1.26)$$

alakban írhatunk fel.

A (2.3.20) és a (2.4.24) formulákat alkalmazva a lineáris lánc esetére, könnyen beláthatjuk, hogy a lineáris lánc belső energiáját az

$$\begin{aligned} E &= \langle H \rangle = N \left\langle \frac{P_n^2}{2M} \right\rangle + N \frac{1}{2} \langle \varphi(R_n - R_{n-1}) \rangle = \\ &= N \frac{1}{2N} \sum_k \frac{\omega_k}{2} \coth(\omega_k/2\theta) + \frac{N}{2} \tilde{\varphi}(l) \end{aligned} \quad (3.1.27)$$

kifejezés segítségével írhatjuk fel. Figyelembe véve azonban a (3.1.20) és (3.1.25) kifejezéseket, a belső energia kifejezését

$$\frac{1}{N} E = \frac{1}{2} \{ \tilde{\varphi}(l) + f(\theta, l) \bar{u}^2 \} \quad (3.1.28)$$

alakban is felírhatjuk.

Így felírtuk a (3.1.20), (3.1.21), (3.1.22), (3.1.25), (3.1.26) és (3.1.28) egyenletekből álló zárt, self-consistens egyenletrendszer, amely meghatározza a lineáris lánc tulajdonságait a pszeudoharmonikus közelítésben. Ezt a self-consistens egyenletrendszert a (3.1.22) self-consistens potenciál teszi meghatározottá, amelyeket kiszámíthatunk, ha az atomok közötti $\varphi(R)$ kölcsönhatási potenciál ismert.

Számításainkban a kölcsönhatási potenciált egy modell-potenciállal, a Morse-potenciállal

$$\varphi(R) = D \{ [e^{-a(R-r_0)} - 1]^2 - 1 \} \quad (3.1.29)$$

helyettesítjük, ahol r_0 — az atomok átlagos távolsága harmonikus közelítésben: $\varphi'(r_0)=0$; D — a potenciálgödör mélysége $\varphi(r_0)=-D$; és a harmonikus erő-állandót a $f=1/2\varphi''(r_0)=Da^2$ kifejezés adja meg. Megjegyezzük [69] alapján, hogy a Morse-potenciál az $a r_0=6$ paraméter megválasztás esetén a lineáris lánc hőtágulási tartományában kevésbé különbözik a Lennard—Jones (12-6) kölcsönhatási potenciáltól, ezért a továbbiakban ezt a paraméter-megválasztást fogjuk használni.

Ekkor a self-consistens potenciálra a (3.1.22) és a (3.1.29) formulákat felhasználva a

$$\tilde{\varphi}(l) = D \{ e^{-2ar_0(\frac{l}{r_0}-1)} e^{2y} - 2e^{-ar_0(\frac{l}{r_0}-1)} e^{y/2} \} \quad (3.1.30)$$

kifejezést nyerjük, ahol bevezettük az $y=a^2\bar{u}^2=36(\bar{u}^2/r_0^2)$ jelölést. Mivel a továbbiakban szükségünk lesz a self-consistens potenciál deriváltjainak kifejezéseire is, kiszámítjuk azokat:

$$\tilde{\varphi}'(l) = -2 \frac{f}{a} \{ e^{-2ar_0(\frac{l}{r_0}-1)} e^{2y} - e^{-ar_0(\frac{l}{r_0}-1)} e^{y/2} \}, \quad (3.1.31)$$

$$\tilde{\varphi}''(l) = 2f \{ 2e^{-2ar_0(\frac{l}{r_0}-1)} e^{2y} - e^{-ar_0(\frac{l}{r_0}-1)} e^{y/2} \}. \quad (3.1.32)$$

Ezek felhasználásával a lineáris lánc állapotegyenletét

$$P^* = 6 \{ e^{-12(\frac{l}{r_0}-1)} e^{2y} - e^{-6(\frac{l}{r_0}-1)} e^{y/2} \} = 6e^{-6(\frac{l}{r_0}-1)} e^{y/2} \{ e^{-6(\frac{l}{r_0}-1)} e^{3y/2} - 1 \} \quad (3.1.33)$$

alakban írhatjuk fel, ahol

$$P^* = P \frac{r_0}{D} \quad (3.1.34)$$

a redukált nyomás.

A fonon frekvenciák pszeudoharmonikus renormálási tényezőjére (3.1.20), (3.1.21), (3.1.32) és (3.1.33) felhasználásával az

$$\alpha^2 = \frac{f(\theta, l)}{f} = e^{-6(\frac{l}{r_0}-1)} e^{y/2} \{ 2e^{-6(\frac{l}{r_0}-1)} e^{3y/2} - 1 \} = \frac{P^*}{6} + e^{-12(\frac{l}{r_0}-1)} e^{2y} \quad (3.1.35)$$

kifejezést nyerjük, amely összefüggést állapít meg a α renormálási együttható és az y mennyiség között. A lineáris lánc (3.1.33) állapotegyenletéből következően

ugyanis, ha a lánc végeire ható nyomást állandónak tartjuk, akkor a lánc hosszúságának kell változnia a hőmérséklet függvényében, vagyis l a (3.1.25) egyenlet alapján hőmérséklet-függő y mennyiség függvénye kell legyen, ha viszont a lánc hosszát rögzítjük, akkor analóg megfontolás alapján a lánc végein jelentkező P nyomás lesz az y mennyiség függvénye.

A fenti megjegyzések figyelembevételével a (3.1.25) egyenletet

$$\lambda \alpha y(\alpha) = \int_0^{\pi/2} d\varphi \sin \varphi \coth(\alpha \sin \varphi / 2\tau) \quad (3.1.36)$$

alakba írhatjuk át, ahol $\lambda = (\pi D / \omega_{0L})$ az atomok dimenzió nélküli kötési állandója, és az $y(\alpha)$ függvényt a (3.1.35) egyenlet határozza meg.

A lineáris lánc (3.1.36) self-consistens egyenletében szereplő integrál közelítőleg kiszámítható analitikusan a magas ($\tau \gg 1$), illetve az alacsony ($\tau \ll 1$) hőmérsékletek esetében, amely határesetekben így módon a (3.1.36) self-consistens egyenletet

$$\lambda \alpha^2 y(\alpha) = \pi \tau \left\{ 1 + \frac{1}{24} \left(\frac{\alpha}{\tau} \right)^2 \right\} \quad (\tau \gg 1), \quad (3.1.37)$$

illetve

$$\lambda \alpha y(\alpha) = 1 + \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{\tau}{\alpha} \right)^2 \quad (\tau \ll 1) \quad (3.1.38)$$

alakban írhatjuk fel.

Lényeges megjegyeznünk, hogy a (3.1.36) self-consistens egyenlet egyértelműen meghatározza a lineáris lánc tulajdonságait a pszeudoharmonikus közelítésben, ugyanis adott λ , τ , l , illetve P^* értékek mellett a (3.1.36) egyenlet megoldása, az α pszeudoharmonikus renormálási tényező ismeretében a (3.1.28), (3.1.30), (3.1.33) és (3.1.35) formulák felhasználásával kiszámíthatjuk az atomok viszonylagos elmozdulásának négyzetes középértékét, az anharmonikus lineáris lánc belső energiáját, és a feladattól függően a lánc hosszát, illetve a lánc végein fellépő nyomást. A továbbiakban tehát az adott külső feltételek mellett keressük a (3.1.36) self-consistens egyenlet megoldását, amelynek segítségével kiszámíthatjuk a lineáris lánc tulajdonságait jellemző mennyiségeket.

A továbbiakban külön fogjuk vizsgálni azt az esetet, amikor a lineáris lánc hosszát tartjuk rögzítettnek és azt az esetet, amikor a lineáris lánc végeire állandó nyomás hat.

3.2. A rögzített hosszúságú lineáris lánc

Vizsgáljuk először azt az esetet, amikor a lineáris lánc hossza rögzített: $L = \text{const.}$ Megjegyezzük, hogy a perturbációszámítás szokásos módszereivel általában ezt az esetet vizsgálják [8], [24], [140].

A lineáris lánc hosszát rögzítsük például úgy, hogy $l = r_0$ legyen. Ilyen megválasztás esetén a self-consistens potenciál (3.1.30) kifejezésére, a lineáris lánc (3.1.33) állapotegyenletére és a (3.1.35) pszeudoharmonikus frekvencia-renormálási

tényezőre az alábbi formulákat nyerjük:

$$\tilde{\varphi}(l=r_0) = D\{e^{2y} - e^{y/2}\}, \quad (3.2.1)$$

$$P^* = 6e^{y/2}\{e^{3y/2} - 1\}, \quad (3.2.2)$$

$$\alpha^2 = e^{y/2}\{2e^{3y/2} - 1\} = \frac{P^*}{6} + e^{2y}. \quad (3.2.3)$$

Először is a (3.1.36) self-consistens egyenlet megoldását kell előállítanunk, ahol az $y(\alpha)$ függvényt a (3.2.3) egyenlet határozza meg. Az így felírt egyenlet analitikusan nem oldható meg a teljes hőmérséklet-intervallumban, ezért a megoldást a (3.1.37), illetve a (3.1.38) egyenletek felhasználásával külön fogjuk kiszámítani az alacsony hőmérsékletek és a magas hőmérsékletek határesetében.

a) A magas hőmérsékletek esete ($\theta \gg \omega_{0L}$)

A (3.2.3) kifejezést behelyettesítve a (3.1.37) egyenletbe, a lineáris lánc tulajdonságait meghatározó self-consistens egyenletet a magas hőmérsékletek határesetében az alábbi alakban írhatjuk fel

$$\lambda_1(y - \lambda_1\eta)(2e^{2y} - e^{y/2}) = 1, \quad (3.2.4)$$

ahol $\lambda_1 = D/\theta$ és $\eta = (\omega_{0L}^2/24D^2) \ll 1$. Könnyen belátható, hogy ennek az egyenletnek minden $y > 0$ esetében van valós megoldása. A nem túlságosan magas hőmérsékletek esetében y értéke elég kicsi: ha $\theta \approx D$, akkor $y \approx 0,3$ és $y = 1$ értéket éri el, ha $\theta \approx 13D$. A perturbációs számítás szokásos módszereivel nyert eredményeknek az az eset felel meg, mikor $\theta \ll D$, ekkor $y \ll 1$:

$$y = \frac{\theta}{D} \left\{ 1 - \frac{7}{2} \frac{\theta}{D} + \frac{1}{24} \frac{\omega_{0L}^2}{\theta^2} \left(1 - \frac{7}{2} \frac{\theta}{D} \right) \right\}. \quad (3.2.5)$$

A (3.2.5) megoldást behelyettesítve a (3.1.20), (3.2.2) és (3.2.3) képletekbe, a rácsrezgések frekvenciájára, illetve a nyomásra az alábbi kifejezéseket nyerjük:

$$\omega_k^2 = \omega_{0k}^2 \left\{ 1 + \frac{7}{2} \frac{\theta}{D} \left(1 + \frac{1}{24} \frac{\omega_{0L}^2}{\theta^2} \right) \right\}, \quad (3.2.6)$$

$$P^* = 9 \frac{\theta}{D} \left\{ 1 + \frac{1}{24} \frac{\omega_{0L}^2}{\theta^2} \right\}. \quad (3.2.7)$$

A (3.1.28) összefüggés felhasználásával kiszámíthatjuk a kristály belső energiáját is

$$\frac{1}{N} E = -\frac{D}{2} + \theta \left(1 + \frac{1}{24} \frac{\omega_{0L}^2}{\theta^2} \right) - \frac{7}{8} \frac{\theta^2}{D}, \quad (3.2.8)$$

ebből pedig az állandó hosszúság melletti fajhőre a

$$C_v = \frac{k}{N} \frac{\partial E}{\partial \theta} = k \left\{ 1 - \frac{1}{24} \frac{\omega_{0L}^2}{\theta^2} - \frac{7}{4} \frac{\theta}{D} \right\} \quad (3.2.9)$$

képletet vezethetjük le.

b) Az alacsony hőmérsékletek esete ($\theta \ll \omega_{0L}$)

A (3.2.3) kifejezést behelyettesítve a (3.1.38) egyenletbe, a lineáris lánc tulajdonságait meghatározó self-consistens egyenletet az alacsony hőmérsékletek határesetében

$$\lambda^2 y^2 (2e^{2y} - e^{y/2}) = 1 + 2\gamma (2e^{2y} - e^{y/2})^{-1} \quad (3.2.10)$$

alakban írhatjuk fel, ahol $\lambda = (\pi D / \omega_{0L})$ és $\gamma = (\pi^2 \theta^2 / 3 \omega_{0L}^2) \ll 1$. Hasonlóan, mint a magas hőmérsékletek határesetében, ennek az egyenletnek is mindig létezik $y > 0$ valós megoldása. A perturbációszámítás szokásos módszereivel nyert eredményeknek az a határeset felel meg, amikor $\lambda \gg 1$, ekkor $y \ll 1$, és a (3.2.10) egyenlet megoldását

$$y = \frac{\omega_{0L}}{\pi D} \left\{ 1 - \frac{7}{4} \frac{\omega_{0L}}{\pi D} + \frac{\pi^2 \theta^2}{3 \omega_{0L}^2} \left(1 - 7 \frac{\omega_{0L}}{\pi D} \right) \right\} \quad (3.2.11)$$

alakban írhatjuk fel. A (3.2.11) megoldás felhasználásával a rácsrezgések frekvenciájára, a nyomásra, a kristály belső energiájára és az állandó hosszúságon mért fajhőre az

$$\omega_k^2 = \omega_{0k}^2 \left\{ 1 + \frac{7}{2} \frac{\omega_{0L}}{\pi D} \left(1 + \frac{\pi^2}{3} \frac{\theta^2}{\omega_{0L}^2} \right) \right\}, \quad (3.2.12)$$

$$P^* = 9 \frac{\omega_{0L}}{\pi D} \left\{ 1 + \frac{\pi^2}{3} \frac{\theta^2}{\omega_{0L}^2} \right\}, \quad (3.2.13)$$

$$\frac{1}{N} E = -\frac{D}{2} + \frac{\omega_{0L}}{\pi} \left\{ 1 + \frac{\pi^2}{3} \frac{\theta^2}{\omega_{0L}^2} \right\} + \frac{7}{8} \frac{\omega_{0L}^2}{\pi^2 D}, \quad (3.2.14)$$

$$C_v = k \frac{2\pi}{3} \frac{\theta}{\omega_{0L}} \left\{ 1 - \frac{7}{4} \frac{\omega_{0L}}{\pi D} \right\} \quad (3.2.15)$$

kifejezéseket vezethetjük le.

A lineáris lánc renormált frekvenciájára (3.2.6) és (3.2.12), belső energiájára (3.2.8) és (3.2.14) és az állandó hosszúságon mért fajhőre (3.2.9) és (3.2.15) nyert kifejezések megegyeznek az ezen mennyiségekre a perturbációszámítás felhasználásával nyert kifejezésekkel [8], [24], [140], amennyiben az utóbbiakban nem vesszük figyelembe az anharmonicitás köbös járulékából eredő tagokat, amelyek a perturbációszámítás második rendjében adnak járulékos tagokat a fenti kifejezésekhez, és amelyeket a pszeudoharmonikus közelítés alkalmazása esetén nem veszünk számításba.

A rögzített hosszúságú lineáris láncban fellépő (3.2.7) és (3.2.13) nyomás jelentős lehet, ha $\theta \approx D$ a magas hőmérsékletek esetében, illetve ha $\omega_{0L} \approx D$ az alacsony hőmérsékletek esetében.

Megjegyezzük, hogy a szomszédos atomok viszonylagos elmozdulása a $\theta \approx D$ illetve a $\omega_{0L} \approx D$ értékek mellett is kis értékű:

$$\frac{\sqrt{\bar{u}^2}}{r_0} = \frac{\sqrt{y}}{ar_0} \approx 0,1 \quad (ar_0 = 6). \quad (3.2.16)$$

Láthatjuk, hogy a rögzített hosszúságú lineáris lánc minden hőmérsékleten stabilis marad. Megjegyezzük, hogy mint majd látni fogjuk, ez az eredményünk érvényes marad akkor is, amikor a self-consistens fononok csillapodását is számításba vesszük.

3.3 Az anharmonikus lineáris lánc állandó nyomás esetében

Vizsgáljuk most azt az esetet, amikor az anharmonikus lineáris láncra állandó nyomás hat: $P = \text{const}$. Ebben az esetben a lineáris lánc hossza függ a hőmérséklettől: $l = l(\theta)$. A szomszédos atomok egyensúlyi távolságát célszerű

$$l(\theta) = l_0 + \delta l = r_0 \left\{ 1 + \frac{1}{4} y + \frac{\delta l}{r_0} \right\} \quad (3.3.1)$$

alakban felírni, ahol l_0 az atomok egyensúlyi távolsága a $P=0$ nyomás esetén, amelyet a (3.1.33) állapotegyenlet felhasználásával határozhatunk meg.

A lineáris lánc (3.1.33) állapotegyenletét az állandó nyomás feltétele mellett a (3.3.1) összefüggés felhasználásával

$$P^* = 6e^{-6\frac{\delta l}{r_0}} e^{-y} (e^{-6\frac{\delta l}{r_0}} - 1) \quad (3.3.2)$$

alakban írhatjuk fel. Felhasználva a (3.1.35), (3.3.1) és (3.3.2) kifejezéseket, a frekvencia pszeudoharmonikus renormálási tényezőjére az

$$\alpha^2 \equiv \frac{f(\theta, l)}{f} = e^{-y} e^{-6\frac{\delta l}{r_0}} \{ 2e^{-6\frac{\delta l}{r_0}} - 1 \} = \frac{P^*}{3} + \frac{1}{2} \left\{ e^{-y} + \sqrt{e^{-2y} + \frac{2P^*}{3} e^{-y}} \right\} \quad (3.3.3)$$

összefüggést nyerjük. A (3.3.3) egyenlőségből kifejezhetjük az y mennyiséget, mint a redukált nyomás és a frekvencia pszeudoharmonikus renormálási tényezőjének függvényét

$$y = \ln \frac{\alpha^2 - \frac{P^*}{6}}{\left(\alpha^2 - \frac{P^*}{3} \right)^2} \quad (3.3.4)$$

alakban.

Állandó nyomás esetében a self-consistens potenciál (3.1.30), az atomok egyensúlyi távolságának (3.3.1) és a kristály belső energiájának (3.1.28) kifejezése felírható, mint az α renormálási tényező és a P^* redukált nyomás függvényei:

$$\tilde{\varphi}(l) = -D \left\{ \alpha^2 - \frac{P^*}{2} \right\} \quad (3.3.5)$$

$$l = r_0 \left\{ 1 + \frac{1}{12} \ln \frac{\alpha^2 - \frac{P^*}{6}}{\left(\alpha^2 - \frac{P^*}{3} \right)^4} \right\} \quad (3.3.6) \quad \frac{1}{N} E = \frac{D}{2} \left\{ \alpha^2 \ln \frac{\alpha^2 - \frac{P^*}{6}}{e \left(\alpha^2 - \frac{P^*}{3} \right)^2} + \frac{P^*}{2} \right\} \quad (3.3.7)$$

Láthatjuk tehát, hogy a lineáris lánc (3.1.36) self-consistens egyenletének a megoldása az adott λ , τ , P^* értékek mellett egyértelműen meghatározza a lineáris lánc tulajdonságait jellemző mennyiségeket. Ezért először a (3.1.36) self-consistens egyenlet tulajdonságait kell megvizsgálnunk.

Vizsgáljuk meg a lineáris lánc (3.1.36) self-consistens egyenlete megoldásainak a viselkedését a magas hőmérsékletek ($\tau \gg 1$) határesetében. Ekkor a (3.1.36) egyenletet felírhatjuk

$$\alpha^2 y(\alpha) = T^* \left\{ 1 + \frac{1}{24} \left(\frac{\pi \alpha}{\lambda T^*} \right)^2 + \dots \right\} \quad (3.3.8)$$

alakban, ahol $T^* = \theta/D = \tau\pi/\lambda$ — a redukált hőmérséklet. Ha a (3.3.8) egyenlet jobb oldalán szereplő sorfejtésnek csak az első tagját vesszük figyelembe és felhasználjuk a (3.3.2)—(3.3.4) összefüggéseket, a (3.3.8) egyenletet felírhatjuk a további vizsgálataink szempontjából kedvezőbb

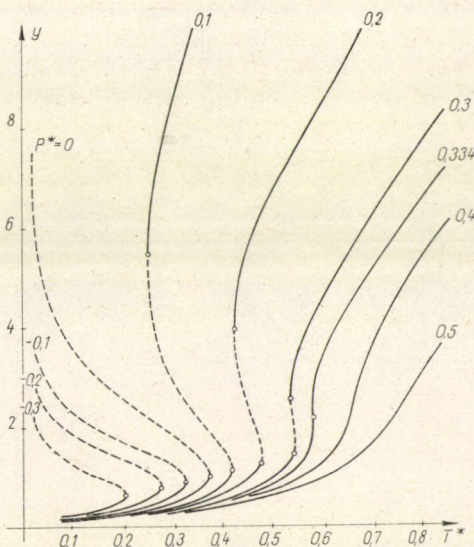
$$F(y) = \left(1 - \frac{P^*}{3T^*} y \right)^2 e^y - \frac{y}{T^*} \left(1 - \frac{P^*}{6T^*} y \right) = 0 \quad (3.3.9)$$

alakban is.

A (3.3.9) egyenletnek a P^* és a T^* mennyiségek értékétől függően 0—4 számú valós és végtelen sok konjugált komplex megoldása van. „Fizikai” megoldásnak a továbbiakban azt a megoldást fogjuk nevezni, amelyik megoldás a harmonikus lineáris láncra vonatkozó egyenlet megoldásához tart, ha az anharmonikus tagok a zérushoz tartanak. A harmonikus megoldás, mint az (3.3.3) és (3.3.8) alapján könnyen belátható,

$$\begin{aligned} y_{\text{harm}} &= \frac{T^*}{\alpha_{\text{harm}}^2} = \\ &= \frac{2T^*}{1 + \frac{2}{3} P^* + \sqrt{1 + \frac{2}{3} P^*}} \end{aligned} \quad (3.3.10)$$

alakban írható fel. A (3.3.9) egyenlet „fizikai” megoldásait a P^* redukált nyomás és a T^* redukált hőmérséklet függvényeként a 3.1. ábra mutatja be. Ha a nyomás ($P^* < P_c^*$) és a hőmérséklet [$T^* \leq T_s^*(P^*)$] elég kicsi, a (3.3.9) egyenletnek vannak valós megoldásai, amelyek közül a legkisebb a „fizikai” megoldás: y_1 . Az y_1 megoldás a lineáris lánc egy stabil S_1 állapotát írja le. A $T_s^*(P^*)$ hőmérsékletet két valós megoldás egybeesése határozza meg, vagyis $y_1(T_s^*) = y_2(T_s^*)$. Ennek következtében a $T_s^*(P^*)$ instabilitási hőmérsékletet,



3.1. ábra. Az anharmonikus lineáris lánc self-consistens egyenletének a megoldásai pszeudoharmonikus közelítésben, a T^* redukált hőmérséklet függvényében a P^* redukált nyomás különböző értékei mellett.

amelyet a fenti feltétel határoz meg, kiszámíthatjuk, mint a

$$F(y)=0 \quad \text{és} \quad F'(y)=0 \quad (3.3.11)$$

egyenletrendszer megoldását. $T^* > T_s^*(P^*)$ esetében az y_1 és az y_2 megoldások komplex konjugált mennyiségek. Ha a láncra ható nyomás negatív $P^* < 0$ (vagyis, ha a láncra állandó nagyságú húzóerő hat) és $T^* > T_s^*(P^*)$, akkor a (3.3.9) egyenletnek nincs valós megoldása, hanem csak komplex konjugált gyökei vannak, és ennek megfelelően a lineáris láncnak nincs stabil állapota. Ez az eset áll fenn minden hőmérsékleten, ha $P^* < 0$ és $|P^*|$ elég nagy. Azonban, ha $P^* > 0$, a komplex konjugált gyökökön kívül még két valós megoldása is van a (3.3.9) egyenletnek, $y_3 < y_4$, amelyek közül a kisebbik a „fizikai” megoldás.

Elegendően magas hőmérséklet $T^* \cong T_c^*$, illetve nyomás $P^* \cong P_c^*$ esetében a (3.3.9) egyenletnek mindig van két valós megoldása, amelyek közül a kisebbik a „fizikai” megoldás. A T_c^* kritikus hőmérsékletet és a P_c^* kritikus nyomást három valós gyök egybeesése determinálja: $y_1(T_c^*, P_c^*) = y_2(T_c^*, P_c^*) = y_3(T_c^*, P_c^*)$, így ezeket a mennyiségeket az

$$F(y)=0; \quad F'(y)=0; \quad F''(y)=0 \quad (3.3.12)$$

egyenletrendszer segítségével számíthatjuk ki.

A T_s^* instabilitási hőmérséklet, a T_c^* kritikus hőmérséklet és a P_c^* kritikus nyomás fizikai jelentésével, értelmezésével később fogunk foglalkozni.

A (3.3.9) egyenlet megoldásainak az analizálása kényelmes módszert adott a $T_s^*(P^*)$ instabilitási hőmérséklet, a T_c^* kritikus hőmérséklet és a P_c^* kritikus nyomás kiszámítására. (3.3.11)-nek megfelelően az instabilitási hőmérsékletet kiszámíthatjuk a (3.1.36) egyenlet és annak α szerinti deriváltjából

$$\lambda \{y'(x) + \alpha y''(x)\} = -\frac{1}{2\tau} \int_0^{\pi/2} d\varphi \sin^2 \varphi sh^{-2}(\alpha \sin \varphi / 2\tau) \quad (3.3.13)$$

képezett egyenletrendszer megoldásaként. A kritikus hőmérsékletet és a kritikus nyomást a (3.3.12)-nek megfelelően kiszámíthatjuk a (3.1.36), (3.3.13) egyenleteknek és a (3.1.36) egyenlet α szerinti második deriváltjából nyert

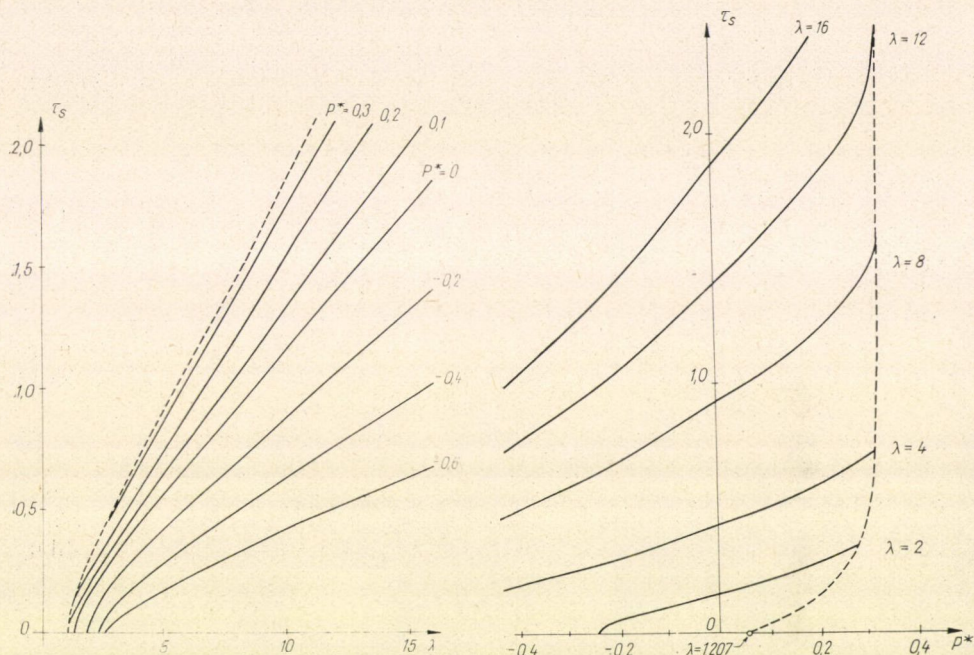
$$\lambda \{2y'(x) + \alpha y''(x)\} = 2 \left(\frac{1}{2\tau} \right)^2 \int_0^{\pi/2} d\varphi \sin^3 \varphi ch(\alpha \sin \varphi / 2\tau) sh^{-3}(\alpha \sin \varphi / 2\tau) \quad (3.3.14)$$

egyenleteknek, mint három egyenletből álló egyenletrendszernek a megoldásaként.

Gépi számítással nyert eredményeinket a 3.2. és a 3.3. ábrán láthatjuk.

A 3.2. ábrán a $\tau_s = (\theta_s / \omega_{0L})$ instabilitási hőmérsékletet ábrázoltuk, mint a $\lambda = (\pi D / \omega_{0L})$ kötési paraméter függvényét a P^* redukált nyomás néhány értéke esetén. A 3.3. ábrán az instabilitási hőmérsékletet a P^* nyomás függvényében ábrázoltuk a λ kötési paraméter néhány értéke mellett. Mind a két ábrán a kritikus hőmérsékletet a szag-

gatott vonal jelzi. A gépi számítások eredményeinek az analízise megmutatta, hogy a gyengén kötött atomokból felépített lineáris lánc esetében, amikor is $\lambda \lesssim 2$ és ennek megfelelően τ értéke is kicsiny, a gépi számítások eredményeiben τ kis értéke miatt nagy a bizonytalanság, illetve a számítási hiba. Ennek kiküszöbölése céljából a gyengén kötött atomokból felépített lineáris lánc esetét külön is számítottuk,



3.2. ábra. A lineáris lánc τ_s instabilitási hőmérséklete pszeudoharmonikus közelítésben, a λ kötési paraméter függvényében a P^* redukált nyomás különböző értékei mellett

3.3. ábra. A lineáris lánc τ_s instabilitási hőmérséklete pszeudoharmonikus közelítésben, a P^* redukált nyomás függvényében a λ kötési paraméter különböző értékei mellett

felhasználva a (3.1.36), a (3.3.13) és a (3.3.14) egyenleteknek az alacsony hőmérsékletek ($\tau \ll 1$) esetére érvényes sorfejtéssel nyert alakjait:

$$\lambda \propto y(\alpha) = 1 + \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{\tau}{\alpha} \right)^2, \quad (3.3.15)$$

$$\lambda \{ y(\alpha) + \alpha y'(\alpha) \} = - \frac{2\pi^2}{3} \frac{\tau^2}{\alpha^3}, \quad (3.3.16)$$

$$\lambda \{ 2y'(\alpha) + \alpha y''(\alpha) \} = 2\pi^2 \frac{\tau^2}{\alpha^4}, \quad (3.3.17)$$

amelyeket számításaink szempontjából kedvezőbb

$$\lambda = \frac{1 + \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{\tau}{\alpha} \right)^2}{\alpha y(\alpha)}, \quad (3.3.18)$$

$$\lambda = - \frac{1 + \pi^2 \left(\frac{\tau}{\alpha} \right)^2}{\alpha^2 y'(\alpha)}, \quad (3.3.19)$$

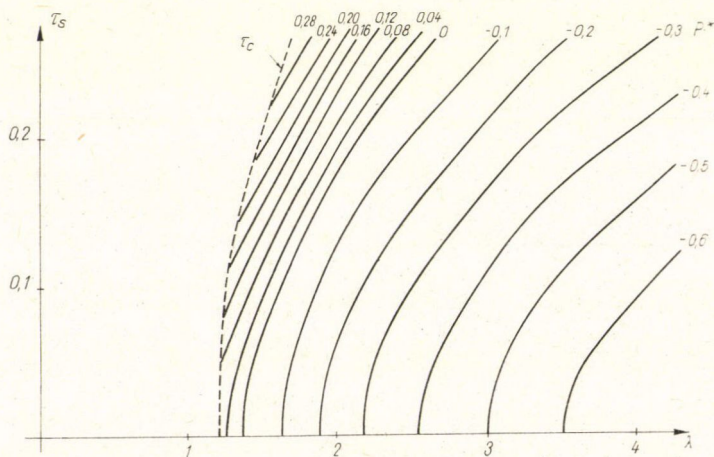
$$\lambda = 2 \frac{1 + 2\pi^2 \left(\frac{\tau}{\alpha} \right)^2}{\alpha^3 y''(\alpha)} \quad (3.3.20)$$

alakban is felírhatunk.

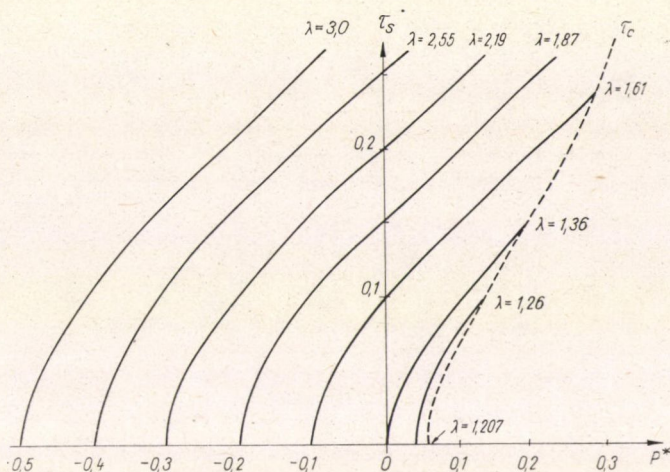
Könnyen belátható, hogy $P^*=0$ esetében a (3.3.19) és a (3.3.20) egyenletek ellentmondásosak, következésképpen $P^*=0$ esetében kritikus hőmérséklet nem létezik. $\tau=0$ esetére a (3.3.18)—(3.3.20) egyenletrendszer analitikus alakban is megoldható, és $\tau=0$ esetében a kritikus nyomás értéke $P_c^*=0,055$, ekkor $\alpha_c=0,266$ és $\lambda_0^{(c)}=1,21$, ahol λ_0 jelöli a λ paraméter értékét $\tau=0$ esetében.

A (3.3.18)—(3.3.20) egyenletrendszer numerikus megoldása alapján nyert eredményeinket a 3.4. és 3.5. ábrán mutatjuk be.

A 3.4. ábrán a τ_s instabilitási hőmérsékletet, mint a λ paraméter függvényét ábrázoltuk adott P^* értékek mellett. A 3.5. ábrán a τ_s instabilitási hőmérséklet P^* redukált nyomástól való függését ábrázoltuk néhány λ érték esetében. A kritikus hőmérsékletet ezeken az ábrákon is szaggatott vonal jelöli.



3.4. ábra. A gyengén kötött atomokból ($\lambda \sim \lambda_0 \approx 1,2$) felépített lineáris lánc τ_s instabilitási hőmérséklete pszeudoharmonikus közelítésben, a λ kötési paraméter függvényében a P^* redukált nyomás különböző értékei mellett ($\theta \ll \omega_D$)



3.5. ábra. A gyengén kötött atomokból ($\lambda \sim \lambda_0 \approx 1,2$) felépített lineáris lánc τ_s instabilitási hőmérséklete pszeudoharmonikus közelítésben, a P^* redukált nyomás függvényében, a λ kötési paraméter különböző értékei mellett ($\theta \ll \omega_D$)

Megjegyezzük, hogy a $\tau=0,1-0,2$ hőmérsékleti tartományban a sorfejtés útján nyert (3.3.18)–(3.3.20) egyenletekből számított értékek és a (3.1.36), (3.3.13), (3.3.14) pontos egyenletek megoldásából számított értékek jól megegyeznek egymással. A 3.2. és 3.3. ábrák megrajzolásánál az alacsony hőmérsékletek esetében a (3.3.18)–(3.3.20) egyenletekből nyert eredményeinket természetesen figyelembe vettük.

A T_c^* kritikus hőmérsékletre és a P_c^* kritikus nyomásra aszimptotikus kifejezéseket is levezethetünk a magas hőmérsékletek határesetében. A magas hőmérsékletek határesetében a (3.1.36), (3.3.13) és (3.3.14) egyenletrendszerben a megfelelő sorfejtést alkalmazva az

$$\alpha^2 \ln \frac{\alpha^2 - \frac{P^*}{6}}{\left(\alpha^2 - \frac{P^*}{3}\right)^2} = T^* + \frac{1}{24} \left(\frac{\pi}{\lambda}\right)^2 \frac{\alpha^2}{T^*}, \quad (3.3.21)$$

$$\ln \frac{\alpha^2 - \frac{P^*}{6}}{\left(\alpha^2 - \frac{P^*}{3}\right)^2} - \frac{\alpha^4}{\left(\alpha^2 - \frac{P^*}{6}\right)\left(\alpha^2 - \frac{P^*}{3}\right)} = \frac{1}{24} \left(\frac{\pi}{\lambda}\right)^2 \frac{1}{T^*}, \quad (3.3.22)$$

$$\alpha^4 - \alpha^2 P^* + \frac{(P^*)^2}{6} = 0 \quad (3.3.23)$$

egyenletrendszerre jutunk. A (3.3.21) és a (3.3.22) egyenleteket felhasználva az in-

stabilitási hőmérsékletre a

$$T_s^* = \frac{\alpha_s^6}{\left(\alpha_s^2 - \frac{P^*}{6}\right) \left(\alpha_s^2 - \frac{P^*}{3}\right)} \quad (3.3.24)$$

kifejezést nyerjük. Az α renormalizációs paraméter kritikus értéke a (3.3.23) egyenlet megoldása, amelyet

$$\alpha_c^2 = \frac{P_c^*}{2} \left(1 + \frac{\sqrt{3}}{2}\right), \quad (3.3.25)$$

alakban írhatunk fel. Ekkor a (3.3.21), (3.3.24) és (3.3.25) egyenletek felhasználásával a kritikus nyomásra és a kritikus hőmérsékletre az alábbi aszimptotikus kifejezéseket nyerjük

$$P_c^* \approx 0,334 \left\{1 - \frac{\sqrt{3}}{24} \left(\frac{\pi}{\lambda}\right)^2\right\}. \quad (3.3.26)$$

$$T_c^* \approx \sqrt{3} P_c^* \approx 0,575 \left\{1 - \frac{\sqrt{3}}{24} \left(\frac{\pi}{\lambda}\right)^2\right\} \quad (3.3.27)$$

Megjegyezzük, hogy a numerikus számítások eredményei $\lambda \geq 2$ esetében jól meg-
egyeznek a (3.3.26) és (3.3.27) aszimptotikus kifejezésekkel.

Tisztáznunk kell még az instabilitási hőmérséklet, a kritikus hőmérséklet és a kritikus nyomás fizikai jelentését és értelmét. Mint láttuk, az instabilitás jelensége a kritikus nyomásnál nagyobb nyomás alkalmazása esetében eltűnik. A P_c^* kritikus nyomás értéke, mint azt a (3.3.26) formulából láthatjuk, kis érték még a magas hőmérsékletek esetében is, ezért az instabilitás jelenségének a további vizsgálatára elegendőnek látszik a kis nyomások $P^* \ll 1$ határesetére szorítkozni, amikor is számításaink eredményeit analitikus alakban is előállíthatjuk.

Ha feltételezzük, hogy a lineáris láncra ható állandó értékű nyomás kicsi: $P^* \ll 1$, akkor a frekvencia pszeudoharmonikus renormálási tényezőjét

$$\alpha^2 \equiv \frac{f(\theta, l)}{f} = e^{-y} \left(1 + \frac{P^*}{2} e^y\right) \quad (3.3.28)$$

alakban írhatjuk fel, mint arról könnyen meggyőződhetünk, ha a (3.3.3) kifejezésben a megfelelő sorfejtést elvégezzük. A (3.3.28) kifejezésből az y mennyiségre az alábbi kifejezést nyerhetjük:

$$y = \ln \frac{1}{\alpha^2 - \frac{P^*}{2}}. \quad (3.3.29)$$

A kis nyomások határesetében a self-consistens potenciál (3.3.5), az atomok egyensúlyi távolsága (3.3.6) és a belső energia (3.3.7) kifejezése felírható

$$\tilde{\varphi}(l) = -De^{-y} \quad (3.3.30)$$

$$l = r_0 \left\{1 + \frac{1}{4}y - \frac{P^*}{36}e^y\right\} \quad (3.3.31) \quad \frac{1}{N}E = -\frac{D}{2} \left\{e^{-y}(1-y) - y \frac{P^*}{2}\right\} \quad (3.3.32)$$

alakban.

Mivel a (3.1.36) self-consistens egyenlet megoldását analitikus alakban kívánjuk előállítani, a magas hőmérsékletek, illetve az alacsony hőmérsékletek határeseteit külön-külön kell vizsgálnunk. A lineáris lánc rezgési frekvenciájának pszeudoharmonikus renormálási tényezőjére nyert (3.3.28) kifejezést behelyettesítve a (3.1.37), illetve a (3.1.38) egyenletekbe, a lineáris lánc self-consistens egyenletét a magas hőmérsékletek $\theta \gg \omega_{0L}$ esetében

$$\lambda_1(y - \lambda_1 \eta) \left(1 + \frac{P^*}{2} e^y \right) = e^y, \quad (3.3.33)$$

illetve az alacsony hőmérsékletek $\theta \ll \omega_{0L}$ esetében

$$\lambda^2 y^2 = e^y \left\{ 1 + \lambda^2 y^2 \left(2\gamma - \frac{P^*}{2} \right) \right\} \quad (3.3.34)$$

alakban kaptuk meg, ahol bevezettük a $\lambda_1 = D/\theta$; $\eta = (\omega_{0L}^2/24D^2) \ll 1$; $\lambda = \pi D/\omega_{0L}$; $\gamma = (\pi^2 \theta^2/3\omega_{0L}^2) \ll 1$ jelöléseket.

a) A magas hőmérsékletek ($\theta \gg \omega_{0L}$) esete

Mint láttuk, a magas hőmérsékletek határesetében a lineáris lánc self-consistens egyenlete a (3.3.33) alakban írható fel. Ennek az egyenletnek valós megoldása akkor van, ha $\theta \leq \theta_s$, ahol θ_s az előzőekben már bevezetett instabilitási hőmérséklet. Az instabilitási hőmérsékletet és az ehhez a hőmérséklethez tartozó $y_s = y(\theta_s)$ megoldást kiszámíthatjuk, ha (3.3.11)-nek megfelelően e két változóra megoldjuk a (3.3.33) egyenletből és annak y szerinti derivált egyenletéből képezett egyenletrendszert. Elvégezve a számításokat, az instabilitási hőmérsékletre a

$$\theta_s = \frac{D}{e} \left\{ 1 + e \left[\frac{P^*}{2} - \frac{1}{24} \frac{\omega_{0L}^2}{D^2} \right] \right\} \quad (3.3.35)$$

kifejezést nyerjük. A (3.3.33) self-consistens egyenlet y megoldását $\theta \leq \theta_s$ esetén

$$y(\theta \leq \theta_s) \approx 1 + e \left(\frac{P^*}{2} - \eta \right) - \sqrt{2(1 - \theta/\theta_s)} \quad (3.3.36)$$

alakban írhatjuk fel. Az instabilitási hőmérséklet közelében $\theta \lesssim \theta_s$ a lineáris lánc pszeudoharmonikus rezgési frekvenciájára (3.3.28) és (3.3.36) felhasználásával az

$$\omega_k^2 = \frac{\omega_{0k}^2}{e} \{ 1 - e\eta + \sqrt{2(1 - \theta/\theta_s)} + (1 - \theta/\theta_s) \} \quad (3.3.37)$$

kifejezést kapjuk. Mint a (3.3.36) és (3.3.37) kifejezésekből láthatjuk, a szomszédos atomok viszonylagos elmozdulásának a négyzetes középértéke y és a rácsrezgések frekvenciája ω_k komplex mennyiséggé válnak, ha $\theta > \theta_s$, ami azt jelenti [5], hogy a lineáris láncnak a $\theta \leq \theta_s$ hőmérsékleti tartományban stabil állapota, $\theta > \theta_s$ esetében már nem lesz stabil állapot.

Az instabilitási hőmérséklet közelében $\theta \lesssim \theta_s$ a lineáris lánc atomjainak az egyensúlyi távolságát (3.3.31) és belső energiáját (3.3.32) az

$$l(\theta \lesssim \theta_s) = \frac{5r_0}{4} \left\{ 1 + \frac{7e}{90} P^* + \frac{e}{5} \frac{1}{24} \left(\frac{\omega_{0L}}{D} \right)^2 - \frac{1}{5} \sqrt{2(1-\theta/\theta_s)} \right\}, \quad (3.3.38)$$

$$\frac{1}{N} E(\theta \lesssim \theta_s) = -\frac{D}{2} + \theta_s \left\{ 1,4 - \frac{P^*}{2} + \frac{\sqrt{2}}{2} \frac{1}{24} \left(\frac{\omega_{0L}}{D} \right)^2 - \frac{1}{2} \sqrt{2(1-\theta/\theta_s)} - (1-\theta/\theta_s) \right\} \quad (3.3.39)$$

formulák adják meg, amelyekből leolvashatjuk, hogy ezek a mennyiségek végesek maradnak, ha $\theta \rightarrow \theta_s$. Ezen mennyiségek hőmérséklet szerinti deriváltjai azonban, a lineáris hőtágulási együttható

$$\alpha_T = \frac{k}{L} \frac{\partial L}{\partial \theta} = \frac{k}{l} \frac{r_0}{4D} \frac{e}{\sqrt{2(1-\theta/\theta_s)}}, \quad (3.3.40)$$

és az állandó nyomáson mért fajhő

$$C_p = \frac{k}{N} \left[\frac{\partial}{\partial \theta} \left(E + \frac{Da}{6} P^* L \right) \right]_{P^* = \text{const}} = k \left\{ 1 + \frac{0,3}{\sqrt{1-\theta/\theta_s}} \right\} \quad (3.3.41)$$

a végtelenhez tart, ha $\theta \rightarrow \theta_s$.

Érdeemes felfigyelnünk arra, hogy a szomszédos atomok viszonylagos elmozdulásának a négyzetes középértéke az instabilitási hőmérsékleten is kis értékű

$$\frac{\sqrt{\bar{u}_s^2}}{l_s} = \frac{\sqrt{y(\theta_s)}}{al(\theta_s)} = \frac{1}{\frac{3}{ar_0 + \frac{1}{2}}} \approx 0,13 \quad (ar_0 = 6). \quad (3.3.42)$$

Az $\omega_{0L} \ll \theta \ll D$ hőmérsékleti tartományban $y \ll 1$, és a (3.3.33) self-consistens egyenlet megoldását

$$y = \frac{\theta}{D} \left\{ 1 + \frac{\theta}{D} + \frac{1}{24} \frac{\omega_{0L}^2}{\theta^2} \left(1 + \frac{\theta}{D} \right) - \frac{P^*}{2} \right\} \quad (3.3.43)$$

alakban írhatjuk fel. E megoldás felhasználásával a lineáris lánc ω_k renormált rezgési frekvenciájára, l hosszára, α_T lineáris hőtágulási együtthatójára, $\frac{1}{N} E$ belső energiájára és c_p állandó nyomáson mért fajhőjére az

$$\omega_k^2 = \omega_{0k}^2 \left\{ 1 + \frac{P^*}{2} - \frac{\theta}{D} \left[1 + \frac{1}{2} \frac{\theta}{D} + \frac{1}{24} \frac{\omega_{0L}^2}{\theta^2} - \frac{P^*}{2} \right] \right\}, \quad (3.3.44)$$

$$l = r_0 \left\{ 1 - \frac{P^*}{36} + \frac{1}{4} \frac{\theta}{D} \left[1 + \frac{1}{24} \frac{\omega_{0L}^2}{\theta^2} + \frac{\theta}{D} - \frac{11}{18} P^* \right] \right\}, \quad (3.3.45)$$

$$\alpha_T = \frac{k}{l} \frac{r_0}{4D} \left\{ 1 + 2 \frac{\theta}{D} - \frac{1}{24} \frac{\omega_{0L}^2}{\theta^2} - \frac{11}{18} P^* \right\}, \quad (3.3.46)$$

$$\frac{1}{N} E = -\frac{D}{2} + \theta \left\{ 1 + \frac{1}{4} \frac{\theta}{D} + \frac{1}{24} \frac{\omega_{0L}^2}{\theta^2} - \frac{P^*}{4} \left(1 + 2 \frac{\theta}{D} \right) \right\}, \quad (3.3.47)$$

$$C_p = k \left\{ 1 - \frac{1}{24} \frac{\omega_{0L}^2}{\theta^2} + \frac{1}{2} \frac{\theta}{D} (1 + P^*) \right\} \quad (3.3.48)$$

kifejezéseket vezethetjük le. Megjegyezzük, hogy a relatív elmozdulások négyzetes középértékére (3.3.43), a lineáris hőtágulási együtthatóra (3.3.46) nyert kifejezések megegyeznek a [143] dolgozatban ezekre a mennyiségekre kapott perturbációs sorfejtések első tagjaival, míg a c_p fajhő (3.3.48) kifejezésében szereplő magasabb rendű járulékos tagok együtthatói mások, mint az idézett dolgozatban, amit az magyaráz, hogy a belső energia kifejezésében a pszeudoharmonikus közelítés nem veszi figyelembe az anharmonicitás köbös tagjából eredő, a perturbációs számítás második közelítésében fellépő járulékos tagokat.

Könnyen előállítható a kritikus hőmérséklet és a kritikus nyomás kifejezése is a $P^* \ll 1$ feltétel mellett. Korábban láttuk azonban, hogy e mennyiségeket fel tudjuk analitikus alakban írni a $P^* \ll 1$ közelítés felhasználása nélkül is.

Az elvégzett numerikus számítások eredményei és a fentebb levezetett aszimptotikus formulák jól megegyeznek egymással $P^* \ll 1$ esetében.

b) Az alacsony hőmérsékletek ($\theta \ll \omega_{0L}$) esete

Mint láttuk, a lineáris lánc self-consistens egyenlete az alacsony hőmérsékletek határesetében a (3.3.34) egyenlet alakjában írható fel. Ennek az egyenletnek valós megoldása akkor van, ha $\lambda > \lambda_0$ és ha $\theta \leq \theta_s$, ahol θ_s az előzőekben már bevezetett instabilitási hőmérséklet és λ_0 az atomok dimenzió nélküli kötési paraméterének azon értéke, amelynek esetében az instabilitási hőmérséklet zérussal válik egyenlővé. Vagyis $\lambda < \lambda_0$ esetében a kristálynak a $T=0^\circ\text{K}$ hőmérsékleten sincs stabil állapota. A θ_s és λ_0 mennyiségeket a (3.3.34) egyenlet és annak derivált egyenlete, mint egyenletrendszer megoldásából határozhatjuk meg:

$$\theta_s = \frac{\omega_{0L}}{\pi e} \sqrt{\frac{6}{e} (\lambda - \lambda_0)}; \quad \lambda_0 = \frac{e}{2} \left\{ 1 - \left(\frac{e}{2} \right)^2 P^* \right\}. \quad (3.3.49)$$

A (3.3.34) egyenlet megoldását $\theta \lesssim \theta_s$ esetében

$$y(\theta \lesssim \theta_s) = 2 \left\{ 1 + \frac{e^2}{2} P^* - \frac{4}{e} (\lambda - \lambda_0) - \sqrt{\frac{4}{e} (\lambda - \lambda_0) (1 - \theta^2/\theta_s^2)} \left[1 - \frac{8}{e} (\lambda - \lambda_0) + \frac{4}{e} (\lambda - \lambda_0) (1 - \theta^2/\theta_s^2) \right] \right\} \quad (3.3.50)$$

alakban írhatjuk fel. A fentiekből következik, hogy ha $\lambda \geq \lambda_0$, akkor létezik olyan pozitív instabilitási hőmérséklet $\theta_s \approx (\lambda - \lambda_0)^{1/2} > 0$, amely hőmérsékletérték alatt a (3.3.34) self-consistens egyenlet gyökei valósak, de amely hőmérsékletérték felett a gyökök komplex mennyiségek. Ha azonban $\lambda < \lambda_0$, akkor a (3.3.34) egyenlet gyökei minden hőmérsékleten komplex mennyiségek, és így a lineáris láncnak egyáltalában nincs stabil állapota. Láthatjuk tehát, hogyha a lineáris lánc atomjainak

nullponti energiája elég nagy, $\frac{\omega_{0L}}{2\pi} > \frac{D}{2}$, akkor a láncnak nincs stabil állapota még a $T=0^\circ\text{K}$ hőmérsékleten sem.

Az instabilitási hőmérséklet közelében $\theta \lesssim \theta_s$ a fizikai mennyiségekre az alábbi formulákat vezethetjük le:

$$\omega_k^2 = \left(\frac{\omega_{0k}}{e}\right)^2 \left\{ 1 - \frac{e^2}{2} P^* + \frac{8}{e} (\lambda - \lambda_0) + \frac{4}{\sqrt{e}} \sqrt{(\lambda - \lambda_0)(1 - \theta^2/\theta_s^2)} \right\}, \quad (3.3.51)$$

$$l = \frac{3}{2} r_0 \left\{ 1 + \frac{7e^2}{27} P^* - \frac{8}{3e} (\lambda - \lambda_0) - \frac{4}{3\sqrt{e}} \sqrt{(\lambda - \lambda_0)(1 - \theta^2/\theta_s^2)} \right\}, \quad (3.3.52)$$

$$\alpha_T = \frac{k}{L} \frac{\partial L}{\partial \theta} = \frac{kr_0}{6l} \frac{\theta}{\omega_{0L}^2} \frac{12\pi^2}{\sqrt{(\lambda - \lambda_0)(1 - \theta^2/\theta_s^2)}}, \quad (3.3.53)$$

$$\frac{1}{N} E = -\frac{D}{2} + \frac{\omega_{0L}}{\pi} \{ 0,8 - 1,25P^* + 0,6(\lambda - \lambda_0) - 0,6(\lambda - \lambda_0)^{3/2}(1 - \theta^2/\theta_s^2)^{1/2} - 0,3(\lambda - \lambda_0)(1 - \theta^2/\theta_s^2) \}, \quad (3.3.54)$$

$$C_p = k \frac{2\pi}{3} \frac{3\theta}{\omega_{0L}} \left\{ 1 + 2 \sqrt{\frac{\lambda - \lambda_0}{1 - \theta^2/\theta_s^2}} \right\}. \quad (3.3.55)$$

Megjegyezzük, hogy az alacsony hőmérsékletek határesetében, éppen úgy, mint a magas hőmérsékletek határesetében, a lineáris lánc hossza és belső energiája véges marad, ha $\theta \rightarrow \theta_s$, míg ezen mennyiségek deriváltjai, a lineáris hőtágulási együttható (3.3.53) és az állandó térfogaton mért fajhő (3.3.55) a végtelenhez tartanak, ha $\theta \rightarrow \theta_s$.

Érdemes továbbá megjegyezni, hogy a szomszédos atomok relatív elmozdulásának a négyzetes középértéke az alacsony hőmérsékletek határesetében is kis értékű marad az instabilitási hőmérsékleten is

$$\frac{\sqrt{\bar{u}_s^2}}{l_s} = \frac{\sqrt{y(\theta_s)}}{al(\theta_s)} = \frac{\sqrt{2}}{ar_0 + 3} \approx 0,13 \quad (ar_0 = 6). \quad (3.3.56)$$

Ha $\omega_{0L} \ll D$ és $\lambda \gg 1$, akkor $y \ll 1$ és a (3.3.34) self-consistens egyenlet megoldását

$$y = \frac{1}{\lambda} \left\{ 1 + \frac{1}{2\lambda} + \gamma \left(1 + \frac{2}{\lambda} \right) - \frac{P^*}{4} \left(1 + \frac{2}{\lambda} \right) \right\} \quad (3.3.57)$$

alakban írhatjuk fel. E megoldás felhasználásával a fizikai mennyiségekre az alábbi kifejezéseket nyerhetjük:

$$\omega_k^2 = \omega_{0k}^2 \left\{ 1 + \frac{P^*}{2} - \frac{1}{\lambda} (1 + \gamma - P^*) \right\}, \quad (3.3.58)$$

$$l = r_0 \left\{ 1 - \frac{P^*}{36} + \frac{1}{4} \frac{\omega_{0L}}{\pi D} \left[1 + \frac{\omega_{0L}}{2\pi D} + \frac{\pi^2}{3} \frac{\theta^2}{\omega_{0L}^2} \left(1 + \frac{2\omega_{0L}}{\pi D} \right) - \frac{13}{36} P^* \right] \right\}, \quad (3.3.59)$$

$$\alpha_T = \frac{kr_0}{6l} \frac{\theta}{\omega_{0L}} \frac{\pi}{D} \left\{ 1 + \frac{2\omega_{0L}}{\pi D} \right\}, \quad (3.3.60)$$

$$\frac{1}{N} E = -\frac{D}{2} + \frac{\omega_{0L}}{\pi} \left\{ 1 - \frac{1}{4} \frac{\omega_{0L}}{\pi D} + \frac{\pi^2 \theta^2}{3 \omega_{0L}^2} \left(1 + 2 \frac{\omega_{0L}}{\pi D} \right) \right\}, \quad (3.3.61)$$

$$C_p = k \frac{2\pi}{3} \frac{\theta}{\omega_{0L}} \left\{ 1 + 2 \frac{\omega_{0L}}{\pi D} \right\}. \quad (3.3.62)$$

Megjegyezzük, hogy a (3.3.58)–(3.3.62) kifejezések a gyengén anharmonikus lineáris lánc tulajdonságait jellemzik az alacsony hőmérsékletek határesetében. A perturbációs számítás szokásos módszereit alkalmazva ez esetben ezeket a kifejezéseket kell megkapnunk.

Megjegyezzük továbbá, hogy a korábban összefoglalt numerikus számítások eredményei és a fentiekben levezetett aszimptotikus formulák az alacsony hőmérsékletek határesetében is jó megegyezést mutatnak, ha $P^* \ll 1$.

*

Kitűzött célunknak megfelelően a pszeudoharmonikus közelítésben részletesen tárgyaltuk az anharmonikus lineáris láncot, mint egy leegyszerűsített, könnyen számolható modellt. A lineáris láncban csak a közvetlenül szomszédos atomok párkölcsönhatását vettük figyelembe, és az atomok közötti kölcsönhatást egy modell-potenciál, a Morse-potenciál segítségével írtuk le. Az anharmonikus kristályok dolgozatunk 2. fejezetében kidolgozott self-consistens elméletének alkalmazása lehetővé tette, hogy a pszeudoharmonikus közelítésben széles hőmérsékleti és nyomáshatárok között vizsgáljuk a lineáris lánc tulajdonságait.

Mint láttuk, a statisztikus mechanika Green-függvényes módszerének felhasználásával levezethetjük a lineáris lánc (3.1.36) self-consistens egyenletét, amely egyenlet megoldásának felhasználásával adott paraméterértékek mellett — λ kötési állandó, T hőmérséklet és P nyomás, illetve L hosszúság — számos fizikai mennyiséget kiszámíthatunk. Dolgozatunkban példaképpen kiszámítottuk a lineáris lánc rezgési frekvenciáját, a szomszédos atomok viszonylagos elmozdulásának négyzetes középértékét, a rendszer belső energiáját, fajhőjét, a lineáris lánc hosszát és lineáris hőtágulási együtthatóját, mint a hőmérséklet és a nyomás függvényét állandó nyomás esetében, illetve a lánc végein fellépő nyomást a hőmérsékletnek és a lánc hosszúságának függvényében, ha a lineáris lánc hossza rögzített. Láttuk, hogy a numerikus számítások eredményei jól megegyeznek a kis nyomások határesetében analitikus alakban nyert eredményeinkkel. Jó egyezést mutatnak eredményeink a megfelelő határesetekben a perturbációs számítás szokásos módszereivel nyert eredményekkel is [8], [24], [140], [143].

Tekintsük át röviden, hogy a kidolgozott self-consistens elmélet alkalmazása a lineáris lánc esetében milyen fizikai követelményekre vezet.

Mint láttuk, a lineáris lánc (3.1.36) self-consistens egyenletének általában több valós megoldása van. Mint „fizikai” megoldást azt a megoldást választottuk ki, amely átmegy a harmonikus feladat megoldásába, ha a potenciális energia sorfejtésének az anharmonikus tagjai a zérushoz tartanak. Az így kiválasztott megoldás, y_1 leírja a lineáris láncot egy stabil, S_1 állapotban. Megjegyezzük, hogy eredményeink szerint az S_1 stabil állapot nem lép fel még a $T=0^\circ\text{K}$ hőmérsékleten sem, egyrészt, ha a lánc atomjai túlságosan gyengén kötöttek ($\lambda < \lambda_0$), ebben az esetben az atomok nullponti energiája elég nagy ahhoz, hogy a stabil állapot kialakulását megakadályozza; másrészt, ha a láncra elegendően nagy húzóerő (negatív nyomás) hat, amikor szemléletünknek is megfelelően a lineáris lánc „szétszakad”.

Láttuk azonban, hogy az S_1 stabil állapot, ha a rendszerre ható nyomás nem túlságosan nagy ($P < P_c$), csak egy meghatározott hőmérsékletig, a $T_s(P)$ instabilitási hőmérsékletig létezik. A $T_s(P)$ instabilitási hőmérsékletnél a (3.1.36) self-consistens egyenlet két valós gyöke: az S_1 stabil állapotot leíró y_1 megoldás és az S_2 instabil állapotot leíró y_2 megoldás egybeesik, majd $T > T_s(P)$ esetében e két gyök egy komplex gyökpárrá válik. Egy egyszerű módszer segítségével könnyen meg tudjuk határozni numerikusan (lásd 3.2. és 3.3. ábra), illetve $P^* \ll 1$ esetében analitikus alakban is (3.3.35), (3.3.49) az instabilitási hőmérsékletet. Eredményeink alapján néhány megjegyzést kívánunk tenni az instabilitási hőmérséklet fizikai jelentését illetően. Jól ismert tény az, hogy jóllehet a lineáris lánc atomjainak az egyensúlyi helyzetétől való átlagos elmozdulása nagy: $\sqrt{\langle u_N^2 \rangle} / l \sim \sqrt{N} \gg 1$, az atomok relatív átlagos elmozdulása, mint láttuk, mégis kicsi: $[\langle (u_n - u_{n-1})^2 \rangle]^{1/2} / l \ll 1$. Ez a tény megmutatja, hogy a lineáris láncban létezik a közeli rend, és ebben az értelemben a lineáris láncot úgy tekinthetjük, mint az atomok kötött rendszerét, amelyben a kollektív gerjesztések, a fononok terjedhetnek [7]. A hőmérséklet növekedésével a fononok száma is növekszik, vagyis növekszik a szomszédos atomok viszonylagos elmozdulásának az amplitúdója. Az a tény, hogy $T > T_s(P)$ esetében a (3.1.36) self-consistens egyenletnek az S_1 stabil állapotnak megfelelő y_1 megoldása — az y_2 megoldással együtt — egy komplex megoldáspárrá válik, arra vezet, hogy a rezgések frekvenciája ugyancsak komplex mennyiség lesz, és ennek következtében az atomok relatív elmozdulása a t idő függvényében végtelenné válik: $[\langle (u_n - u_{n-1})^2 \rangle]^{1/2} \sim \sim e^{\gamma t}$ ($\gamma > 0$). Tehát a lineáris lánc, mint az atomoknak a kölcsönhatási potenciál vonzó része által létrehozott kötött állapota, kis nyomások esetében ($P < P_c$) a $T_s(P)$ instabilitási hőmérsékleten instabillá válik a kollektív gerjesztések — a self-consistens fononok terjedése vonatkozásában.

Mint láttuk, ha $T \rightarrow T_s(P)$, a lineáris lánc hossza (3.3.38), (3.3.52) és belső energiája (3.3.39), (3.3.54) véges értékhez tart, míg e mennyiségek hőmérséklet szerinti deriváltjai, a lineáris hőtágulási együttható (3.3.40), (3.3.53) és a fajhő (3.3.41), (3.3.55) a végtelenhez tartanak. Megjegyzésre érdemes az az eredményünk is, hogy a szomszédos atomok viszonylagos elmozdulásának négyzetes középértéke az instabilitási hőmérsékleten is ($T = T_s(P)$) lényegesen kisebb, mint az atomok egyensúlyi távolsága az adott hőmérsékleten (3.3.42), (3.3.56).

Mint a 3.1. ábrából láthatjuk, $P > 0$ esetében fellép egy másik, S_3 stabil állapot is, amelyet az y_3 megoldás jellemez. Megjegyezzük azonban, hogy az általunk használt egyfázisú modell esetében ez az állapot is a lineáris láncnak egy kötött állapota, amelyben azonban a szomszédos atomok viszonylagos elmozdulásának négyzetes középértéke lényegesen nagyobb, mint az S_1 állapotban. $P < 0$ esetében második stabil állapot nem lép fel, ebben az esetben, ha $T > T_s(P)$, a lineáris lánc (3.1.36) self-consistens egyenletének csak komplex megoldásai vannak.

A fentieket úgy értelmezhetjük, hogy a $T = T_s(P)$ hőmérsékletnél egy elsőrendű fázisátalakulás zajlik le, amikor is a lineáris lánc egy S_1 stabil állapotból átmegy egy S_3 stabil állapotba, ha $0 < P < P_c$.

A P_c kritikus nyomás fellépte a lineáris lánc rezgési instabilitási tartományának végét jelenti: a rácsrezgések ez esetben már nem tudják a lineáris láncot, mint az atomok kötött állapotát lerombolni, amelyet ez esetben a nyomás, mint külső tér stabilizál, limitálva az atomok rezgési amplitúdóit.

A rögzített végű lineáris lánc esetében az instabilitás jelensége nem lép fel,

ebben az esetben a lineáris lánc (3.1.36) self-consistens egyenletének minden hőmérséklet- és nyomásérték mellett van valós megoldása. A fent elmondottak alapján érthető ez az eredményünk is. A lineáris lánc végein ez esetben fellépő nyomás a (3.2.7), illetve a (3.2.13) formuláknak megfelelően a hőmérséklettel gyorsan nő, és $T \sim T_s$ esetében $P > P_c$, és így a lineáris rács hosszának rögzítéséhez szükséges külső nyomás már képes a fentiek szerint a lineáris láncot stabilizálni.

A fentiekben röviden összefoglaltuk a lineáris lánc elméletét a pszeudoharmonikus közelítésben és kifejtettük, hogy eredményeink milyen fizikai képre vezetnek. A pszeudoharmonikus közelítés azonban nem veszi figyelembe a fononok csillapodására vezető rugalmatlan szórási folyamatokat. A továbbiakban a három-fonon rugalmatlan szórási folyamatokat figyelembe vevő effektív köbös anharmonikus közelítésben fogjuk vizsgálni az anharmonikus lineáris lánc tulajdonságait, és megnézzük, hogy a fononok véges élettartamának a figyelembevételé mennyiben befolyásolja eddigi eredményeinket.

B.

Az anharmonikus lineáris lánc elmélete az effektív köbös anharmonikus közelítésben

3.4. A self-consistens egyenletrendszer

Alkalmazzuk a (3.1.1) Hamilton-operátorral leírt lineáris rácsra dolgozatunk 2.5. pontjában kifejtett self-consistens elméletet. Ekkor a (2.5.1) egy-fonon Green-függvényre a (2.5.24) formulának megfelelően a

$$G_k(\omega) = \langle\langle A_k | A_k^+ \rangle\rangle_\omega = \frac{2\omega_k}{\omega^2 - \omega_k^2 - 2\omega_k \Pi_k(\epsilon_k)} \quad (3.4.1)$$

kifejezést nyerjük, ahol ω_k a lineáris lánc (3.1.20) képlettel megadott pszeudoharmonikus rezgési frekvenciája.

A (2.5.1) egy-fonon Green-függvény $\Pi_k(\epsilon_k)$ tömegoperátorát a renormált köbös anharmonikus kölcsönhatás első rendjében fogjuk kiszámítani, vagyis a tömegoperátor kifejezésében a betöltési számokat és a rezgési frekvenciákat a pszeudoharmonikus közelítésben vesszük számításba. Ekkor a tömegoperátort a

$$\begin{aligned} \Pi_k(\epsilon_k) \approx \Pi_k(\omega_k) = & \frac{1}{8N} \frac{g^2(\theta, l)}{f^3(\theta, l)} \sum_{p, p'} \frac{(n_p + n_{p'} + 1)(\omega_p + \omega_{p'})}{\omega^2 - (\omega_p + \omega_{p'})^2} - \\ & - \frac{(n_p - n_{p'})(\omega_p - \omega_{p'})}{\omega^2 - (\omega_p - \omega_{p'})^2} \Big\} \omega_k \omega_p \omega_{p'} \Delta(p + p' - k) \end{aligned} \quad (3.4.2)$$

kifejezést adja meg, ahol $n_p = [\exp(\omega_p/\theta) - 1]^{-1}$.

Az $f(\theta, l)$ pszeudoharmonikus és a $g(\theta, l)$ effektív köbös anharmonikus erőállandót self-consistens módon határozzuk meg:

$$f(\theta, l) = \frac{1}{2} \tilde{\varphi}''(l); \quad g(\theta, l) = \frac{1}{2} \tilde{\varphi}'''(l), \quad (3.4.3)$$

ahol $\tilde{\varphi}(l)$ a (3.1.22) képlettel megadott self-consistens potenciál. A szomszédos atomok viszonylagos elmozdulásának a négyzetes középértékét (2.5.26)-nak megfelelően a (2.5.1) egy-fonon Green-függvény segítségével fejezhetjük ki:

$$\overline{u^2(l)} = \langle (u_n - u_{n-1})^2 \rangle = \frac{1}{2Nf(\theta, l)} \sum_k \frac{\omega_k}{\pi} \int_0^\infty d\omega \coth(\omega/2\theta) [-\text{Im } G_k(\omega + i\delta)]. \quad (3.4.4)$$

Az ϵ_k renormált fonon frekvenciákat és a fononok Γ_k félértékszélességét a (2.5.27) és (2.5.28) formulák adják meg, amelyeket itt újra kiírunk:

$$\epsilon_k = \omega_k + \text{Re } \Pi_k(\epsilon_k), \quad (3.4.5)$$

$$\Gamma_k = -\text{Im } \Pi_k(\epsilon_k + i\delta). \quad (3.4.6)$$

A lineáris lánc állapotegyenlete, amely összefüggést állapít meg a lineáris lánc egyensúlyi paraméterei között, a (3.1.26) egyenlet alakjában írható fel.

A lineáris lánc F szabadenergiáját és E belső energiáját a (2.5.31), (2.5.33), (2.5.36), (3.1.28) kifejezések figyelembevételével

$$F = \theta \sum_k \{2 \sinh(\omega_k/2\theta)\} + \frac{N}{2} \{\tilde{\varphi}(l) - f(\theta, l) \overline{u^2(l)}\} + \tilde{F}_3(\theta), \quad (3.4.7)$$

$$E = \langle H \rangle = \frac{N}{2} \{\tilde{\varphi}(l) + f(\theta, l) \overline{u^2(l)}\} + 5\tilde{F}_3(\theta) \quad (3.4.8)$$

alakban írhatjuk fel, ahol

$$\tilde{F}_3(\theta) = \frac{1}{6} \sum_k \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega (e^{\omega/\theta} - 1)^{-1} \frac{\omega^2 - \omega_k^2}{\omega_k} [-\text{Im } G_k(\omega + i\delta)] \quad (3.4.9)$$

az effektív köbös anharmonicitás járuléka első rendben a szabadenergia kifejezéséhez.

A lineáris lánc tulajdonságait meghatározó self-consistens egyenletrendszer megoldásához meg kell adnunk az atomok közötti kölcsönhatás potenciálját, amelyet most éppen úgy, mint a pszeudoharmonikus közelítés számítása esetében, a (3.1.29) Morse-potenciálnak választunk meg az $ar_0 = 6$ paraméter-megválasztással.

A (3.4.4) egyenletben szereplő ω szerinti integrál a véges fononélettartam esetén nem számítható ki olyan egyszerűen, mint ahogy az a pszeudoharmonikus közelítés esetében kiszámítható volt, és kiszámítása gépi számítást igényel. A (3.4.4) egyenletre azonban fel tudunk írni analitikus kifejezést, ha az alacsony, illetve a magas hőmérsékletek határeseteit külön-külön számítjuk. Ekkor az összegezést a [24] dolgozatban adott módon elvégezve, a lineáris lánc (3.4.4) self-consistens egyenletét, a (3.4.5) renormált fonon frekvenciákat és a (3.4.6) fonon-félértékszélességeket a magas, illetve az alacsony hőmérsékletek határesetében az alábbi alakban írhatjuk fel:

a) a magas hőmérsékletek esete $\theta \gg \omega_L$.

$$\alpha_1^2 f \bar{u}^2 = \theta \left(1 + \frac{1}{24} \frac{\alpha_1^2 \omega_{0L}^2}{\theta^2} \right), \quad (3.4.10)$$

$$\epsilon_k^2 = \omega_{0k}^2 \frac{f(\theta, l)}{f} \left\{ 1 - \theta \frac{g^2(\theta, l)}{f^3(\theta, l)} \right\} \equiv \omega_{0k}^2 \alpha_1^2(\theta, l), \quad (3.4.11)$$

$$\Gamma_k(\epsilon_k) \approx \Gamma_k(\omega_k) = \theta \frac{g^2(\theta, l)}{16f^3(\theta, l)} \omega_L [1 + 9(\pi - kl)9(\pi + kl)], \quad (3.4.12)$$

ahol ω_L a maximális pszeudoharmonikus rezgési frekvencia.

b) az alacsony hőmérsékletek esete $\theta \ll \omega_L$.

$$\alpha_2 f \bar{u}^2 = \frac{\omega_{0L}}{\pi} \left\{ 1 + \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{\theta}{\alpha_2 \omega_{0L}} \right)^2 \right\}, \quad (3.4.13)$$

$$\epsilon_k^2 = \omega_{0k}^2 \frac{f(\theta, l)}{f} \left[1 - \frac{g^2(\theta, l)}{2f^3(\theta, l)} \frac{\omega_L}{\pi} \left(1 + \frac{\pi^2}{3} \frac{\theta^2}{\omega_L^2} \right) \right] \equiv \omega_{0k}^2 \alpha_2^2(\theta, l). \quad (3.4.14)$$

Mint a (3.4.11) és (3.4.14) kifejezésekből láthatjuk, a frekvencia renormálása $\alpha_i(\theta, l)$ ($i=1, 2$) az adott közelítésben csupán az erőállandó renormálására vezet, és a renormálás k -től nem függ.

A továbbiakban a magas hőmérsékletek és az alacsony hőmérsékletek esetét külön fogjuk vizsgálni. Éppen úgy, mint a pszeudoharmonikus közelítés tárgyalásakor, először a rögzített hosszúságú lineáris lánc esetét fogjuk vizsgálni, és azután tanulmányozzuk azt az esetet, amikor a lineáris láncra állandó nyomás hat.

3.5. A rögzített hosszúságú lineáris lánc

Vizsgáljuk meg először azt az esetet, mikor a lineáris lánc hossza rögzített, $L = \text{const}$. Rögzítsük a lánc hosszát például úgy, hogy $l = r_0$ legyen. Ilyen megválasztás esetén a self-consistens potenciált a (3.2.1), a lineáris lánc állapotegyenletét a (3.2.2), a pszeudoharmonikus frekvencia renormálási tényezőit a (3.2.3) kifejezések adják meg, míg az effektív köbös erőállandóra a

$$g(\theta, l) = \frac{g}{3} e^{y/2} \{ 4e^{3y/2} - 1 \} \quad (3.5.1)$$

kifejezést nyerjük, ahol $g = (1/2) \varphi'''(r_0) = -3Da^3$.

a) A magas hőmérsékletek esete ($\theta \gg \omega_L$)

A (3.2.3) és (3.5.1) kifejezéseket (3.4.11) figyelembevételével behelyettesítve a (3.4.10) egyenletbe, a lineáris lánc self-consistens egyenletét az effektív köbös közelítésben a magas hőmérsékletek határesetében

$$\lambda_1(y - \lambda_1 \eta) (2e^{2y} - e^{y/2}) \left[1 - \frac{1}{2\lambda_1} e^{-2y} \frac{(4 - e^{-3y/2})^2}{(2 - e^{-3y/2})^3} \right] = 1 \quad (3.5.2)$$

alakban írhatjuk fel, ahol $\lambda_1 = \theta/D$ és $\eta = (\omega_{0L}^2/24D^2) \ll 1$. Könnyen belátható, hogy a (3.5.2) self-consistens egyenletnek minden hőmérséklet mellett van valós megoldása az $y > 0$ változóra, vagyis ugyanaz a helyzet áll fenn, mint a pszeudoharmonikus közelítés (3.2.4) self-consistens egyenlete esetében. A perturbációs számítás szokásos módszereivel nyert eredményeknek az az eset felel meg, amikor $\theta \ll D$, de ekkor $y \ll 1$, és a megoldást

$$y = \frac{\theta}{D} \left\{ 1 + \frac{\theta}{D} + \frac{1}{24} \frac{\omega_{0L}^2}{\theta^2} \left(1 - \frac{7}{2} \frac{\theta}{D} \right) \right\} \quad (3.5.3)$$

alakban írhatjuk fel. A (3.5.3) megoldás felhasználásával a (3.4.11) renormált fonon frekvenciára, a fononok (3.4.12) félértékszélességre és a (3.4.8) belső energiára az

$$\epsilon_k^2 = \omega_{0k}^2 \left\{ 1 - \frac{\theta}{D} \left[1 - \frac{131}{8} \frac{\theta}{D} \right] \right\}, \quad (3.5.4)$$

$$\frac{\Gamma_k}{\epsilon_L} = \frac{9}{8} \frac{\theta}{D} \left\{ 1 - \frac{13}{4} \frac{\theta}{D} \right\} \quad (|kl| < \pi), \quad (3.5.5)$$

$$\frac{1}{N} E = -\frac{D}{2} + \theta \left(1 + \frac{1}{24} \frac{\omega_{0L}^2}{\theta^2} \right) - \frac{1}{8} \frac{\theta}{D} \quad (3.5.6)$$

kifejezéseket nyerjük, amelyek és a fajhő $c_v = (k/N)(\partial E/\partial \theta)$ kifejezése megegyezik a perturbációs sorfejtés alacsonyabb rendű tagjaival [140], [24]. (Megjegyezzük, hogy az idézett dolgozatokban a következő paramétereket használták: $\gamma = f = Da^2$; $\delta^2/\gamma^3 = 9/D$; $\epsilon/\gamma^2 = 7/D$.)

A lineáris lánc végein fellépő nyomásra a (3.2.2) és a (3.5.3) kifejezések felhasználásával a

$$P^* = 9 \frac{\theta}{D} \left\{ 1 + \frac{9}{4} \frac{\theta}{D} + \frac{1}{24} \frac{\omega_{0L}^2}{\theta^2} \left(1 - \frac{\theta}{D} \right) \right\} \quad (3.5.7)$$

kifejezést vezettük le.

b) Az alacsony hőmérsékletek esete ($\theta \ll \omega_L$)

A (3.2.3) és a (3.5.1) kifejezéseket (3.4.14) figyelembevételével behelyettesítve a (3.4.13) egyenletbe, a lineáris lánc self-consistens egyenletét az alacsony hőmérsékletek határesetében az effektív köbös anharmonikus közelítésben

$$\begin{aligned} \lambda^2 y^2 (2e^{2y} - e^{y/2}) \left[1 - \frac{1}{2\lambda} e^{-y} \frac{(4 - e^{-3y/2})^2}{(2 - e^{-3y/2})^{5/2}} \left(1 + \gamma \frac{e^{-2y}}{2 - e^{-3y/2}} \right) \right] = \\ = 1 + 2\gamma \left\{ (2e^{2y} - e^{y/2}) \left[1 - \frac{1}{2\lambda} e^{-y} \frac{(4 - e^{-3y/2})^2}{(2 - e^{-3y/2})^{5/2}} \right] \right\}^{-1} \end{aligned} \quad (3.5.8)$$

alakban írhatjuk fel, ahol $\lambda = \pi D/\omega_{0L}$ és $\gamma = (\pi^2 \theta^2/3\omega_{0L}^2) \ll 1$. Ugyanúgy, mint a magas hőmérsékletek határesetében és a pszeudoharmonikus közelítésben a megfelelő egyenleteknek, a (3.5.8) self-consistens egyenletnek is minden hőmérsékleten van

az $y > 0$ változóra valós megoldása. A perturbációs számítás szokásos módszereivel nyert eredményeknek az az eset felel meg, amikor $\lambda \gg 1$, akkor $y \ll 1$ és a (3.5.8) self-consistens egyenlet megoldását

$$y = \frac{1}{\lambda} \left\{ 1 + \frac{1}{2\lambda} + \gamma \left(1 + \frac{2}{\lambda} \right) \right\} \quad (3.5.9)$$

alakban írhatjuk fel. A (3.5.9) megoldás felhasználásával a (3.4.14) renormált rezgési frekvenciára és a (3.4.8) belső energiára az

$$\epsilon_k^2 = \omega_{0k}^2 \left\{ 1 - \frac{1}{\lambda} \left[1 + \frac{45}{8} \frac{1}{\lambda} + \gamma \left(1 - \frac{8}{\lambda} \right) \right] \right\} \quad (3.5.10)$$

$$\frac{1}{N} E = -\frac{D}{2} + \frac{\omega_{0L}}{\pi} \left\{ 1 + 2,17 \frac{1}{\lambda} + \gamma \left(1 - 0,38 \frac{1}{\lambda} \right) \right\} \quad (3.5.11)$$

kifejezéseket nyerjük, amelyek és az állandó térfogaton mért fajhő kifejezése megegyeznek a [140] dolgozatban nyert perturbációs sorfejtés alacsonyabb rendű tagjaival.

A lineáris lánc végein fellépő nyomásra a (3.2.2) és a (3.5.9) kifejezések felhasználásával a

$$P^* = 9 \frac{1}{\lambda} \left[1 + \frac{7}{4} \frac{1}{\lambda} + \gamma \left(1 + \frac{9}{2} \frac{1}{\lambda} \right) \right] \quad (3.5.12)$$

kifejezést vezettük le, amellyel kapcsolatban érdemes megjegyeznünk, hogy a lánc végein fellépő nyomás a nullponti rezgések következtében a zérustól különbözik $T=0^\circ\text{K}$ hőmérsékleten is.

3.6. Az anharmonikus lineáris lánc állandó nyomás esetében

Vizsgáljuk most azt az esetet, mikor a lineáris láncra állandó $P = \text{const.}$ nyomás hat. Ekkor a self-consistens potenciált a (3.3.5), a lánc hosszát a (3.3.6), a pseudo-harmonikus frekvencia renormálási tényezőit a (3.3.3), a szomszédos atomok relatív elmozdulásának négyzetes középértékét a (3.3.4) kifejezések adják meg, míg az effektív köbös erőállandóra a

$$g(\theta, l) = g \left\{ \alpha^2 - \frac{P^*}{9} \right\} \quad (3.6.1)$$

kifejezést vezethetjük le, amelyet kis nyomások $P^* \ll 1$ esetén

$$g(\theta, l) = g e^{-\gamma} \left\{ 1 + \frac{7}{18} P^* \right\} \quad (3.6.2)$$

alakban is felírhatunk.

a) A magas hőmérsékletek esete ($\theta \gg \omega_L$)

A magas hőmérsékletek határesetében felhasználva a (3.4.11) kifejezést a lineáris lánc (3.4.10) self-consistens egyenletét közelítőleg felírhatjuk

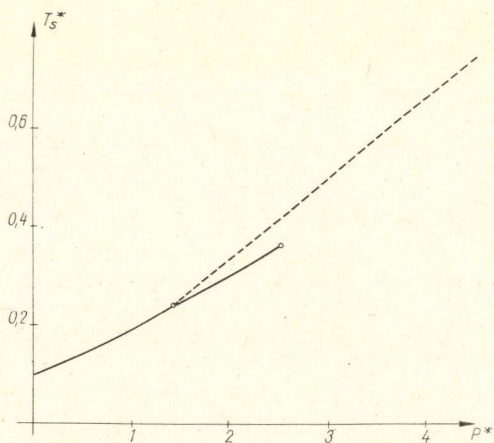
$$\alpha^2 y(\alpha) = T^* \left\{ \left[1 - T^* D \frac{g^2(\theta, l)}{f^3(\theta, l)} \right]^{-1} + \frac{1}{24} \left(\frac{\alpha\pi}{\lambda T^*} \right)^2 \right\} \quad (3.6.3)$$

alakban. Ha az erősen kötött atomokból felépített lineáris lánc vizsgálatára szorítkozunk, amikor is $\lambda \gg 1$, a (3.3.3) és a (3.5.1) kifejezések felhasználásával a (3.6.3) egyenletet átírhatjuk

$$\left[1 - \left(\frac{P^*}{3T^*} - B \right) y \right]^2 e^y - \frac{y}{T^*} \left[1 - \left(\frac{P^*}{6T^*} - B \right) y \right] = 0 \quad (3.6.4)$$

alakba, ahol $B = 0,5 \{ 2 + [1 + (2P^*/3)e^y]^{-1/2} \}^2$.

A (3.6.4) self-consistens egyenletet numerikus módszerrel, gépi számítással oldottuk meg, és annak alapján tanulmányoztuk az egyenlet és annak megoldása tulajdonságait. Foglalkunk röviden össze eredményeinket. A T_s^* instabilitási hőmérsékletet, mint a P^* redukált nyomás függvényét, a 3.6. ábrán mutatjuk be. Ha $P^* \leq P_1^* \approx 1,5$, a lineáris láncnak csak egy stabil állapota van, amely a $T^* \leq T_s^*(P^*)$ hőmérsékleti tartományban létezik, ha viszont $T^* > T_s^*(P^*)$, a lineáris láncnak stabil állapota nincs. A $P_1^* \leq P^* \leq P_c^*$ nyomástartományban, ha $T^* > T_s^*(P^*)$, a lineáris láncnak van egy második stabil állapota is, amelyben azonban a szomszédos atomok relatív elmozdulásának a négyzetes középértéke lényegesen nagyobb, mint a $T^* \leq T_s^*(P^*)$ hőmérsékleti tartományban létező S_1 első stabil állapotban. A P_c^* kritikus nyomást az S_1 első stabil állapot rezgési instabilitásának a megszűntje jellemzi. A magas hőmérsékletek határesetében a P_c^* kritikus nyomásra és a T_c^* kritikus hőmérsékletre a $P_c^* \approx 2,5$ és a $T_c^* \approx 0,37$ értékeket nyertük. Összehasonlítva



3.6. ábra. A lineáris lánc T_s^* redukált instabilitási hőmérséklete a P^* redukált nyomás függvényében ($\theta \gg \omega_D$; $\lambda \gg \lambda_0 \approx 6,8$)

a kritikus paramétereknek a fononok csillapodása figyelembevételével kapott értékeit azokkal az értékekkel, amelyeket e mennyiségekre a pszeudoharmonikus közelítésben nyertünk (3.3.26), (3.3.27), láthatjuk, hogy a csillapodás figyelembevételével a kritikus hőmérséklet értéke csökkent, míg a kritikus nyomás értéke lényegesen megnőtt.

Ha azonban a nyomás $P^* \leq P_1^*$, akkor a $T_d^*(P^*)$ hőmérsékletnél a lineáris lánc minden stabil állapota eltűnik. Ezt a hőmérsékletet, mint a nyomás függvényét a szaggatott vonal jelöli a 3.6. ábrán. A számítások megmutatták, hogy a $T^* > T_d^*(P^*)$, $P^* > P_1^*$ tartományban a (3.6.4) self-consistens egyenletnek csak komplex megoldásai vannak. A pszeudoharmonikus közelítés-

ben, mint az könnyen belátható, a $T_d^*(P^*)$ görbét a $P^*=0$ egyenes írja le. Megjegyezzük, hogyha $T^* \rightarrow T_d^*(P^*)$, a második stabil állapotot leíró megoldás $y_3 \rightarrow \infty$.

Hasonlóan, mint a pszeudoharmonikus közelítésben, ha feltételezzük, hogy a lineáris láncra ható nyomás kicsiny: $P^* \ll 1$, számításainkat analitikusan is elvégezhetjük, és eredményeinket analitikus alakban is felírhatjuk.

A (3.4.11), (3.3.28) és (3.6.2) kifejezések felhasználásával a magas hőmérsékletek határesetében a lineáris lánc (3.4.10) self-consistens egyenletét a

$$\lambda_1(y - \lambda_1 \eta) \left[1 - \frac{9}{2\lambda_1} e^y + \frac{P^*}{2} e^y \left(1 + \frac{2}{\lambda_1} e^y \right) \right] = e^y \quad (3.6.5)$$

alakban írhatjuk fel, ahol $\lambda_1 = D/\theta$; $\eta = (\omega_{0L}^2/24D^2) \ll 1$. A (3.6.5) egyenletnek valós megoldása $\theta \leq \theta_s$ esetében van, ahol θ_s az instabilitási hőmérséklet, amelyet a már többször alkalmazott módszer szerint határozhatunk meg:

$$\theta_s = \frac{D}{10} (1 + 0,95P^* - 10\eta). \quad (3.6.6)$$

A θ_s instabilitási hőmérséklet környezetében a (3.6.5) self-consistens egyenlet megoldását

$$y(\theta \lesssim \theta_s) = 0,37 + 0,25P^* + 10\eta - 0,7 \sqrt{1 - \theta/\theta_s} \quad (3.6.7)$$

alakban írhatjuk fel, a rezgési frekvenciára pedig az

$$\epsilon_k^2 = \frac{\omega_{0k}^2}{4} [1 + 0,2P^* - 10\eta + 1,8 \sqrt{1 - \theta/\theta_s} + 2,3(1 - \theta/\theta_s)] \quad (3.6.8)$$

kifejezést nyertük. Láthatjuk, hogy mindkét mennyiség komplex mennyiséggé válik, ha $\theta > \theta_s$, ami a rendszer instabilitását jelenti. Mint korábban láttuk, a pszeudoharmonikus közelítés ugyanerre a következtetésre vezet. Az instabilitási hőmérséklet környezetében a fononok csillapodását a

$$\frac{\Gamma_k}{\epsilon_L} = \frac{9}{8} \frac{\theta}{D} e^y \left[1 - \frac{9}{2} \frac{\theta}{D} e^y \right]^{1/2} \approx 0,27 \quad (|kl| < \pi) \quad (3.6.9)$$

kifejezéssel adhatjuk meg, ahol $\epsilon_L = \epsilon_k(kl = \pi)$.

A lineáris lánc hossza, amelyet a (3.3.31) és a (3.6.7) kifejezések segítségével számíthatunk ki, és a (3.4.8) belső energia, amelyet az

$$\frac{1}{N} E = -\frac{D}{2} + \theta_s \left[1,6 \left(1 - \frac{P^*}{2} \right) + \frac{1}{48} \frac{\omega_{0L}^2}{\theta_s^2} - 1,4 \sqrt{1 - \theta/\theta_s} - 0,8(1 - \theta/\theta_s) \right] \quad (3.6.10)$$

kifejezéssel adunk meg az instabilitási hőmérséklet közelében, végesek maradnak, ha $\theta \rightarrow \theta_s$. A lineáris hőtágulási együttható

$$\alpha_T = \frac{k}{L} \frac{\partial L}{\partial \theta} = \frac{k}{l} \frac{3}{2aD} \frac{3}{\sqrt{1 - \theta/\theta_s}}, \quad (3.6.11)$$

és az állandó nyomáson mért fajhő

$$C_p = \frac{k}{N} \left[\frac{\partial}{\partial \theta} (E + PL) \right]_p = 0,8k \left(1 + \frac{0,9}{\sqrt{1 - \theta/\theta_s}} \right) \quad (3.6.12)$$

a végtelenhez tartanak, ha $\theta \rightarrow \theta_s$.

Abban a hőmérsékleti tartományban, amelyre a $\omega_L \ll \theta \ll D$ egyenlőtlenség áll fenn, $y \ll 1$ és a (3.6.5) self-consistens egyenlet megoldását

$$y = \frac{\theta}{D} \left[1 + \frac{11}{2} \frac{\theta}{D} + \frac{1}{24} \frac{\omega_{0L}^2}{\theta^2} \left(1 + \frac{\theta}{D} \right) - \frac{P^*}{2} \right] \quad (3.6.13)$$

alakban írhatjuk fel. A (3.6.13) megoldás felhasználásával a renormált frekvenciára, a csillapodásra és a belső energiára az

$$\epsilon_k^2 = \omega_{0k}^2 \left[1 + \frac{P^*}{2} - \frac{\theta}{D} \left(\frac{11}{2} + 5 \frac{\theta}{D} + \frac{1}{24} \frac{\omega_{0L}^2}{\theta^2} - \frac{3}{2} P^* \right) \right], \quad (3.6.14)$$

$$\frac{\Gamma_k}{\epsilon_L} = \frac{9}{8} \frac{\theta}{D} \left[1 - \frac{13}{18} P^* + \frac{13}{4} \frac{\theta}{D} + \frac{1}{24} \frac{\theta}{D} \frac{\omega_{0L}^2}{\theta^2} \right] \quad (|kl| < \pi), \quad (3.6.15)$$

$$\frac{1}{N} E = -\frac{D}{2} + \theta \left[1 + \frac{\theta}{D} + \frac{1}{24} \frac{\omega_{0L}^2}{\theta^2} - \frac{P^*}{4} \left(1 + \frac{26}{3} \frac{\theta}{D} \right) \right] \quad (3.6.16)$$

formulákat nyerjük. Megjegyezzük, hogy $\theta = \theta_s$ esetében a (3.6.14)–(3.6.16) formulák közelítőleg ugyanazokra a számértékekre vezetnek, mint amiket a $\theta \lesssim \theta_s$ feltétel felhasználásával levezetett (3.6.8)–(3.6.10) formulák felhasználásával ez esetben kapunk.

Megjegyezzük továbbá, hogy a (3.6.13) megoldás felhasználásával a fajhőre

$$C_p = k \left[1 - \frac{1}{24} \frac{\omega_{0L}^2}{\theta^2} + 2 \frac{\theta}{D} - \frac{19}{12} P^* \frac{\theta}{D} \right] \quad (3.6.17)$$

és a lineáris hőtágulási együtthatóra

$$\alpha_T = \frac{k}{l} \frac{3}{2aD} \left(1 + 11 \frac{\theta}{D} - \frac{1}{24} \frac{\omega_{0L}^2}{\theta^2} - \frac{11}{18} P^* \right) \quad (3.6.18)$$

levezetett kifejezéseink, valamint a szomszédos atomok viszonylagos elmozdulása négyzetes középértékére ($\bar{u}^2 = y/a^2$) nyert (3.6.13) formulánk jól megegyezik a [143] dolgozatban a perturbációszámítás szokásos módszereivel nyert perturbációs sorfejtés első tagjaival.

b) Az alacsony hőmérsékletek esete ($\theta \ll \omega_L$)

Az alacsony hőmérsékletek határesetében dolgozatunkban csak a $P^* \ll 1$ eset tárgyalására szorítkozunk. A lineáris lánc (3.4.13) self-consistens egyenletét az alacsony hőmérsékletek határesetében a (3.3.28) és a (3.6.1) kifejezések felhasználásával

$$\lambda^2 y^2 \left(1 - \frac{9}{2\lambda} e^{y/2} \right) = e^y \left\{ 1 + \lambda^2 y^2 \left[\gamma \left(2 + \frac{9}{2\lambda} e^{y/2} \right) - \frac{P^*}{2} \left(1 - \frac{1}{4\lambda} e^{y/2} \right) \right] \right\} \quad (3.6.19)$$

alakban írhatjuk fel, ahol $\lambda = \pi D / \omega_{0L}$ és $\gamma = (\pi^2 \theta^2 / 3 \omega_{0L}^2) \ll 1$. A (3.6.19) egyenletnek valós megoldása $\lambda \cong \lambda_0$ és $\theta \cong \theta_s$ esetében van. A λ_0 és a θ_s mennyiségeket a már többször is alkalmazott módon meghatározva, e mennyiségekre a

$$\theta_s = \frac{\omega_{0L}}{1,6\pi} \sqrt{\lambda - \lambda_0}; \quad \lambda_0 = 6,8(1 - 0,2P^*) \quad (3.6.20)$$

képletet nyerjük. A (3.6.19) self-consistens egyenlet megoldását az instabilitási hőmérséklet környezetében

$$y(\theta \lesssim \theta_s) = 0,5 \{ 1 + 1,25P^* - (\lambda - \lambda_0) - 1,6 \sqrt{(\lambda - \lambda_0)(1 - \theta^2/\theta_s^2)} [1 - (\lambda - \lambda_0)] + \\ + 2,6(\lambda - \lambda_0)(1 - \theta^2/\theta_s^2) \} \quad (3.6.21)$$

alakban írhatjuk fel, a rezgési frekvenciára pedig az

$$\epsilon_k^2 = (0,3 \omega_{0k})^2 \{ 1 + 1,35P^* + 1,3(\lambda - \lambda_0) + 3 \sqrt{(\lambda - \lambda_0)(1 - \theta^2/\theta_s^2)} - \\ - 2(\lambda - \lambda_0)(1 - \theta^2/\theta_s^2) \} \quad (3.6.22)$$

kifejezést nyerjük. Mind a két mennyiség komplex mennyiséggé válik, ha $\lambda < \lambda_0$, vagy ha $\theta > \theta_s$, ami a lineáris lánc adott állapotának instabilitását jelenti.

Az instabilitási hőmérséklet környezetében $\theta \lesssim \theta_s$ a lineáris lánc belső energiája, amelyet az

$$\frac{1}{N} E = -\frac{D}{2} + \frac{\omega_{0L}}{\pi} \{ 0,9 + 0,85P^* - 0,4(\lambda - \lambda_0) - \\ - 0,7[1 + 1,9(\lambda - \lambda_0)] \sqrt{(\lambda - \lambda_0)(1 - \theta^2/\theta_s^2)} - 0,4(\lambda - \lambda_0)(1 - \theta^2/\theta_s^2) \} \quad (3.6.23)$$

képlettel adhatunk meg, és a lineáris lánc hossza, amelyet a (3.3.31) és (3.6.21) kifejezések segítségével számíthatunk ki, végesek maradnak, ha $\theta \rightarrow \theta_s$, illetve ha $\lambda \rightarrow \lambda_0$. De ezen mennyiségek hőmérséklet szerinti deriváltjai, a lineáris hőtágulási együttható

$$\alpha_T = \frac{k}{al} \frac{\theta}{\omega_{0L}^2} \frac{3\pi^2}{\sqrt{(\lambda - \lambda_0)(1 - \theta^2/\theta_s^2)}}, \quad (3.6.24)$$

és az állandó nyomáson mért fajhő

$$C_p = k \frac{2\pi}{3} \frac{3\theta}{\omega_{0L}} \left(1 + \frac{0,9}{\sqrt{(\lambda - \lambda_0)(1 - \theta^2/\theta_s^2)}} \right) \quad (3.6.25)$$

a végtelenhez tartanak, ha $\lambda \rightarrow \lambda_0$, illetve ha $\theta \rightarrow \theta_s$.

Ha $\lambda \gg 1$, a (3.6.19) self-consistens egyenlet megoldása a következő alakban írható fel

$$y = \frac{1}{\lambda} \left\{ 1 + \frac{11}{4} \frac{1}{\lambda} + \gamma \left(1 + \frac{11}{\lambda} \right) - \frac{P^*}{4} \left(1 + \frac{17}{2\lambda} \right) \right\}, \quad (3.6.26)$$

amelyből leolvashatjuk, hogy ebben az esetben $y \ll 1$. A (3.6.26) megoldás felhasz-

nálásával a renormált frekvenciára és a lineáris lánc belső energiájára az

$$\epsilon_k^2 = \omega_k^2 \left\{ 1 + \frac{P^*}{2} - \frac{11}{2\lambda} \left(1 + \gamma - \frac{1}{44} P^* \right) \right\}, \quad (3.6.27)$$

$$\frac{1}{N} E = -\frac{D}{2} + \frac{\omega_{0L}}{\pi} \left[1 - \frac{7}{4\lambda} + \gamma \left(1 + \frac{2}{\lambda} \right) - \frac{11}{48} \frac{1}{\lambda} P^* \right] \quad (3.6.28)$$

képleteket nyerjük. Megjegyezzük, hogy ezekből a formulából számított értékek $\theta = \theta_s$ esetében nem egyeznek meg olyan jól a (3.6.22) és (3.6.23) formulából számított értékkel, mint amilyen jó egyezést találtunk a magas hőmérsékletek határ-esetében, ugyanis a most tárgyalt esetben y_s , mint láttuk, nem kicsi $y_s \approx 0,5$.

A fajhőre és a lineáris hőtágulási együtthatóra a

$$C_p = k \frac{2\pi}{3} \frac{\theta}{\omega_{0L}} \left(1 + \frac{2}{\lambda} \right), \quad (3.6.29)$$

$$\alpha_T = \frac{k}{al} \frac{\theta}{\omega_{0L}} \frac{\pi}{D} \left(1 + \frac{11}{\lambda} \right) \quad (3.6.30)$$

kifejezéseket vezethetjük le. A (3.6.26)–(3.6.30) formulák alkalmasak arra, hogy a perturbációszámítással kapható eredményekkel hasonlítsuk őket össze.

Végül érdemes megjegyezni, hogy a szomszédos atomok viszonylagos elmozdulásának a négyzetes középértéke kis mennyiségnek adódik:

$$\frac{\sqrt{\bar{u}_s^2}}{l_s} = \frac{\sqrt{y(\theta_s)}}{al(\theta_s)} \approx 0,1 \quad (ar_0 = 6), \quad (3.6.31)$$

mind az alacsony, mind a magas hőmérsékletek esetében.

*

Láthatjuk, hogy az anharmonikus kristályoknak dolgozatunk 2. fejezetében kifejtett self-consistens elmélete viszonylag egyszerű módszert nyújt arra, hogy a lineáris lánc tulajdonságait széles hőmérsékleti és nyomáshatárok között vizsgáljuk. Számításainkat két közelítésben is elvégeztük, a pszeudoharmonikus közelítésben és a fononok csillapodását is figyelembe vevő effektív köbös közelítésben. E két közelítésben kapott eredményeinket összehasonlítva láthatjuk, hogy azok alapvonásaikban megegyeznek, jóllehet a számszerű értékekben természetesen különbségek adódnak. Ezért nem érezzük szükségét a jelen fejezet 3. pontja végén összefoglalt elemzést még egyszer megismételni. A fellépő instabilitási jelenség behatásos elemzését célszerűbbnek látszik a három dimenziós kristály tárgyalásával kapcsolatban elvégezni.

4. A háromdimenziós anharmonikus kristály

Az anharmonikus kristályoknak dolgozatunk 2.5. pontjában kifejtett self-consistens elmélete lehetővé teszi, hogy széles hőmérsékleti és nyomáshatárok között tanulmányozzuk elméletileg az anharmonikus kristályok tulajdonságait.

Mint azt a 2. fejezet 5. pontjában láttuk, a kristály tulajdonságait meghatározó self-consistens egyenletrendszer a kristályrács atomjainak a kölcsönhatási potenciálja ismeretében válik meghatározottá. Dolgozatunk 4. fejezetében a közvetlenül szomszédos atomok centrális párkölcsönhatását feltételezve végezzük el a számításokat. Ahhoz, hogy az általános elmélet alapján elvégzett számításaink konkrét, számszerű eredményekre vezessenek, meg kell választanunk a kristályrács típusát is. A lapcentrált köbös kristályrácsot választottuk ki, és számításainkat erre a rács-típusra vonatkoztatva végezzük el. Megjegyezzük, hogy a köbös rácsok közül egyedül a lapkoncentrált köbös rács bizonyul stabilnak [7] a közvetlenül szomszédos atomok centrális párkölcsönhatása feltételezése esetén.

Jóllehet ez a modell a reális kristályoknak meglehetősen szűk körére jelent jó közelítést, mégis célszerű ezt a modellt részletesen tanulmányozni. E modell esetében ugyanis a számítások viszonylag könnyen és áttekinthetően keresztülvihetők — bizonyos esetekben, mint látni fogjuk, analitikusan is —, és így következtetéseket vonhatunk le a reális anharmonikus kristályok tulajdonságaira. Megjegyezzük, hogy ezt a modellt részletesen tárgyalták a perturbációszámítás szokásos módszereinek felhasználásával is (lásd például [140]—[142], [144]—[145]), és vizsgálták a pszeudoharmonikus közelítésben [75] is.

A 4.1. pontban a 2.5. pontban levezetett általános érvényű formulákat alkalmazzuk kiválasztott modellünkre, és felírjuk a kristály tulajdonságait meghatározó self-consistens egyenletrendszert modellünkre vonatkoztatva. Az anharmonikus kristály tulajdonságait állandó térfogat esetén a 4.2. pontban, míg állandó nyomás esetén a 4.3. pontban tanulmányozzuk. A 4.4. pontban az instabilitási hőmérsékletet számítjuk ki pszeudoharmonikus közelítésben. Eredményeinket a 4.5. pontban összegezzük.

4.1. A self-consistens egyenletrendszer

Tekintsünk egy N számú, egyforma, M tömegű atomból felépített lapcentrált köbös kristályrácsot. Ha csak a közvetlenül szomszédos atomok centrális párkölcsönhatását vesszük figyelembe, a kristályrács Hamilton-operátorát adiabatikus közelítésben a

$$H = \sum_l \frac{\vec{P}_l^2}{2M} + \frac{1}{2} \sum_{l \neq m}' \varphi(|\vec{R}_l - \vec{R}_m|) \quad (4.1.1)$$

alakban írhatjuk fel, ahol \vec{P}_l és \vec{R}_l az l rácspontban elhelyezkedő atom impulzus-, illetve helyzetvektor operátora, $\varphi(|\vec{R}_l - \vec{R}_m|)$ a közvetlenül szomszédos atomok centrális párkölcsönhatási potenciálja. Az összegezés jele mellett a vessző arra utal, hogy a második összegezést a z számú közvetlenül szomszédos atomra kell elvégezni. A lapcentrált köbös rács esetén $z=12$.

Alkalmazzuk a (4.1.1) Hamilton-operátorral leírt lapcentrált köbös kristályrácsra az anharmonikus kristályoknak dolgozatunk 4.5. pontjában kifejtett self-consistens elméletét. Számításainkban az $u_l^\alpha = R_l^\alpha - l_\alpha$ elmozdulás-operátorokkal képzett $\langle\langle u_l^\alpha(t); u_l^\beta(t') \rangle\rangle$ Green-függvény helyett célszerű a b_{kj}^+ fonon keltő és a b_{kj} fonon eltüntető operátorok $A_{kj} = b_{kj} + b_{kj}^+$ lineáris kombinációjából felépített $G_{kj}(t-t') = \langle\langle A_{kj}(t); A_{kj}^+(t') \rangle\rangle$ Green-függvényeket felhasználni. A (2.2.3)

és (2.2.4) kifejezések felhasználásával könnyen belátható, hogy az említett Green-függvények között az

$$\langle\langle u_l^\alpha(t); u_{l'}^\beta(t') \rangle\rangle = \frac{1}{MN} \sum_{kj} \frac{e_{kj}^\alpha e_{kj}^\beta}{2\omega_{kj}} e^{ik(l-l')} G_{kj}(t-t') \quad (4.1.2)$$

összefüggés áll fenn.

A $G_{kj}(t-t')$ Green-függvény Fourier-transzformáltjára dolgozatunk 2.5. pontjában a (2.5.24) kifejezést nyertük, amit itt újra kiírunk:

$$G_k(\omega) \equiv \langle\langle A_k | A_k^+ \rangle\rangle_\omega = \frac{2\omega_k}{\omega^2 - \omega_k^2 - 2\omega_k \Pi_k(\omega)}. \quad (4.1.3)$$

A (4.1.3) kifejezésben szereplő $\omega_k (k = \{\vec{k}, j\})$ frekvenciákat és a \vec{e}_{kj} polarizációs vektorokat pszeudoharmonikus közelítésben (2.5.10)-nek megfelelően az

$$\omega_{kj}^2 e_{kj}^\alpha = \frac{1}{M} \sum_{l,\beta} e_{kj}^\beta (1 - e^{ikl}) \frac{l_\alpha l_\beta}{l^2} f(\theta, l) \quad (4.1.4)$$

egyenlet határozza meg. Figyelembe véve, hogy csak a közvetlenül szomszédos atomok kölcsönhatását vesszük számításba, amikor is $|l|$ minden atomra azonos, a (4.1.4) egyenletet átírhatjuk az

$$\omega_{kj}^2 = \frac{f(\theta, l)}{M} \sum_l \frac{(l \vec{e}_{kj})}{l^2} (1 - e^{ikl}) = \frac{f(\theta, l)}{f} \omega_{0kj}^2 \quad (4.1.5)$$

alakba, ahol ω_{0kj} az f erőállandónak megfelelő harmonikus rezgési frekvencia ($P=0$ esetben). Mint láthatjuk, ha csupán a közvetlenül szomszédos atomok kölcsönhatását vesszük figyelembe, akkor a frekvencia pszeudoharmonikus renormálása az erőállandó renormálására korlátozódik, és \vec{k} -től nem függ. A $G_{kj}(\omega)$ egy-fonon Green-függvény tömegoperátorát a (2.5.19) és (2.5.25) formuláknak megfelelően

$$\Pi_k(\omega) = \sum_{p,p'} |\tilde{V}_3(-k, p, p')|^2 \frac{1}{2} \left\{ \frac{(N_p + N_{p'}) (\omega_p + \omega_{p'})}{\omega^2 - (\omega_p + \omega_{p'})^2} - \frac{(N_p - N_{p'}) (\omega_p - \omega_{p'})}{\omega^2 - (\omega_p - \omega_{p'})^2} \right\} \quad (4.1.6)$$

alakban írhatjuk fel modellünk esetében, ahol $N_p = \langle A_p^+ A_p \rangle$.

Centrális párkölsönhatás esetén a $|\tilde{V}_3|^2$ függvényt a (2.5.8) formulának és a [144] dolgozatnak megfelelően

$$|\tilde{V}_3(-k, p, p')|^2 = \frac{\Delta(\vec{p} + \vec{p}' - \vec{k})}{4M^3 N \omega_k \omega_p \omega_{p'}} g^2(\theta, l) F^2(-k, p, p') \quad (4.1.7)$$

alakban írhatjuk fel, ahol

$$F(\vec{k}j, \vec{k}_1 j_1, \vec{k}_2 j_2) = \sum_{\vec{n}} (-1)^{\frac{d}{2} \vec{\tau} \cdot \vec{n}} (\vec{n} \cdot \vec{e}_{kj}) (\vec{n} \cdot \vec{e}_{k_1 j_1}) (\vec{n} \cdot \vec{e}_{k_2 j_2}) \times \\ \times \sin\left(\frac{d}{4} \vec{n} \cdot \vec{k}\right) \sin\left(\frac{d}{4} \vec{n} \cdot \vec{k}_1\right) \sin\left(\frac{d}{4} \vec{n} \cdot \vec{k}_2\right) \quad (4.1.8)$$

egy, a rácspontokra számított dimenzió nélküli összeg, $\vec{n} = \vec{l}/(d/2)$, d a ráczállandó, l a közvetlenül szomszédos atomok egyensúlyi távolsága, $2\pi\vec{\tau}$ a reciprokrács vektora.

A (4.1.5) és (4.1.7) egyenletekben szereplő $f(\theta, l)$ pszeudoharmonikus és $g(\theta, l)$ effektív köbös anharmonikus erőállandót self-consistens módon határozzuk meg:

$$f(\theta, l) = \tilde{\varphi}''(l); \quad g(\theta, l) = \tilde{\varphi}'''(l), \quad (4.1.9)$$

ahol $\tilde{\varphi}(l)$ a self-consistens potenciál, amelyet pszeudoharmonikus közelítésben számítottunk ki. Ekkor (2.3.26) összefüggés alapján írhatjuk:

$$\langle \varphi(|\vec{R}_l - \vec{R}_m|) \rangle \approx \tilde{\varphi}(|l - \bar{m}|) = \exp \left\{ \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} \langle (u_l^\alpha - u_m^\alpha) (u_l^\beta - u_m^\beta) \rangle \nabla_l^\alpha \nabla_l^\beta \right\} \varphi(|l - \bar{m}|). \quad (4.1.10)$$

A self-consistens potenciál (4.1.10) kifejezése lényegesen egyszerűbb alakot ölt, ha a potenciál deriváltjainak a számításánál a [141] dolgozatban is felhasznált leading-term közelítést alkalmazzuk:

$$\nabla_{l_1}^{\alpha_1} \nabla_{l_1}^{\beta_1} \dots \nabla_{l_n}^{\alpha_n} \nabla_{l_n}^{\beta_n} \varphi(l) \approx \frac{l_{\alpha_1} l_{\beta_1}}{l^2} \dots \frac{l_{\alpha_n} l_{\beta_n}}{l^2} \varphi^{(2n)}(l), \quad (4.1.11)$$

ahol $\bar{m}=0$ értéket vettük. A potenciális energia sorfejtésének csak a köbös és negyedrendű anharmonikus tagjait véve figyelembe, *Vo Hong Anh* megvizsgálta a fenti közelítés alkalmazhatóságát modellünk esetében [82], és megmutatta, hogy a (4.1.11) közelítésben elhanyagolt tagok figyelembevétele nem változtatja meg lényegesen a (4.1.11) közelítés alkalmazásával elvégzett számítások eredményeit. A (4.1.11) közelítést felhasználva a self-consistens potenciált

$$\tilde{\varphi}(l) \approx \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{1}{2} \overline{u^2(l)} \right)^n \varphi^{(2n)}(l) \quad (4.1.12)$$

alakban írhatjuk fel, ahol $\overline{u^2(l)}$ a szomszédos atomok relatív elmozdulásának négyzetes középértéke. Ezt a mennyiséget a (4.1.2), (4.1.3) Green-függvény segítségével tudjuk kiszámítani:

$$\begin{aligned} \overline{u^2(l)} &= \frac{\langle [\vec{l}(\vec{u}_l - \vec{u}_0)]^2 \rangle}{l^2} = \frac{1}{zf(\theta, l)N} \sum_k \omega_k \langle A_k^+ A_k \rangle = \\ &= \frac{1}{zf(\theta, l)N} \sum_k \omega_k \frac{1}{\pi} \int_0^\infty d\omega \coth(\omega/2\theta) [-\text{Im } G_k(\omega + i\delta)]. \end{aligned} \quad (4.1.13)$$

A (4.1.13) egyenlet levezetésekor figyelembe vettük, hogy $\overline{u^2(l)}$ csak a szomszédos atomok egyensúlyi távolságától függ, és felhasználtuk a (4.1.5) kifejezést.

Az egyensúlyi rácsállandót ($d=l/\sqrt{2}$) a kristály (2.5.30) állapotegyenletéből számíthatjuk ki, amelyet esetünkben

$$P = -\frac{1}{3V} \sum_{l, \alpha} l_\alpha \left\langle \frac{\partial U}{\partial R_l^\alpha} \right\rangle = -\frac{zl}{6v} \tilde{\varphi}'(l) = -\frac{2\sqrt{2}}{l^2} \tilde{\varphi}'(l) \quad (4.1.14)$$

alakban írhatunk fel, ahol $v=V/N=l^3/\sqrt{2}$.

A (4.1.13) egyenlet a kristály self-consistens egyenlete, amelyet a (4.1.3), (4.1.5), (4.1.6), (4.1.7), (4.1.8), (4.1.9), (4.1.12) és (4.1.14) egyenletek, illetve kifejezések figyelembevételével kell megoldani, meghatározza a kristály egyensúlyi paramétereit. Az ϵ_k renormált fonon frekvenciákat és a fononok Γ_k csillapodását (2.5.27) és (2.5.28) alapján az

$$\epsilon_{kj} = \omega_{kj} + \text{Re } \Pi_{kj}(\epsilon_{kj}); \quad \Gamma_{kj}(\epsilon_{kj}) = -\text{Im } \Pi_{kj}(\epsilon_{kj} + i\delta) \quad (4.1.15)$$

formulák felhasználásával számíthatjuk ki.

Felhasználva a Hamilton-operátor (4.1.1) alakját és a kristály (4.1.13) self-consistens egyenletét, a kristály (2.5.31) belső energiáját és (2.5.36) szabadenergiáját célszerűen

$$E = \langle H \rangle = \frac{Nz}{2} \left\{ \tilde{\varphi}(l) + \frac{1}{2} f(\theta, l) \overline{u^2(l)} \right\} + 5\tilde{F}_3(\theta) \quad (4.1.16)$$

$$F = F_0 + \frac{Nz}{2} \left\{ \tilde{\varphi}(l) - \frac{1}{2} f(\theta, l) \overline{u^2(l)} \right\} + \tilde{F}_3(\theta) \quad (4.1.17)$$

alakban írhatjuk fel, ahol

$$F_0 = \theta \sum_k \ln \{2 \sinh(\omega_k/2\theta)\}, \quad (4.1.18)$$

és az effektív köbös anharmonikus járulék a szabadenergia kifejezéséhez (2.5.33) alapján közelítőleg az

$$\begin{aligned} \tilde{F}_3(\theta) = -\frac{1}{6} \sum_{k, p, p'} |\tilde{V}_3(k, p, p')|^2 & \left\{ \frac{(1+n_p)(1+n_{p'})(1+n_k) - n_p n_{p'} n_k}{\omega_p + \omega_{p'} + \omega_k} + \right. \\ & \left. + \frac{n_k(1+n_p+n_{p'}) - n_p n_{p'}}{\omega_p + \omega_{p'} - \omega_k} \right\} \end{aligned} \quad (4.1.19)$$

formula segítségével adható meg, ahol $n_p = [\exp(\omega_p/\theta) - 1]^{-1}$. Megjegyezzük, hogy a belső energia és a szabadenergia ismeretében számos termodinamikai és rugalmas mennyiséget kiszámíthatunk a termodinamika, illetve a statisztikus mechanika jól ismert összefüggéseinek felhasználásával.

Láthatjuk tehát, hogy a (4.1.13) self-consistens egyenlet megoldását felhasználva az anharmonikus kristály fizikai tulajdonságait jellemző mennyiségeket ki tudjuk számítani a (4.1.15)–(4.1.19) képletek segítségével.

A fenti self-consistens egyenletrendszer a centrális párkölcsönhatási potenciál konkrét alakjának a megadása teszi meghatározottá. Számításainkban a kölcsönhatási potenciált egy modell-potenciállal, a Morse-potenciállal:

$$\varphi(R) = \epsilon \{e^{-2a(R-r_0)} - 2e^{-a(R-r_0)}\} \quad (4.1.20)$$

helyettesítjük, ahol r_0 az atomok közötti egyensúlyi távolság harmonikus közelítésben: $\varphi'(r_0)=0$; ϵ a potenciálgödör mélysége: $\varphi(r_0)=-\epsilon$ és az erőállandót harmonikus közelítésben $P=0$ esetén a $f=\varphi''(r_0)=2\epsilon/a^2$ kifejezés adja meg. Megjegyezzük [69] alapján, hogy a Morse-potenciál az $ar_0=6$ paraméter-megválasztás esetén a rács hőtágulási tartományban alig különbözik a realisztikusabb Lennard—Jones (12—6) kölcsönhatási potenciáltól:

$$\varphi_{L-J}(R) = 4\epsilon \left\{ \left(\frac{\sigma}{R} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{R} \right)^6 \right\}, \quad (4.1.21)$$

ahol $\sigma^6 = r_0^6/2$ a Lennard—Jones potenciál paramétere. Minthogy a (4.1.12) self-consistens potenciál kiszámításához a kölcsönhatási potenciál deriváltjainak az értékét kell megadni az $R=l$ helyen, ahol általában $l-r_0 \lesssim 0,3r_0$, ezért a Morse-potenciál felhasználásával számított mennyiségek az $ar_0=6$ paraméter-megválasztás esetén várhatóan kevésbé különböznek a Lennard—Jones (12—6) potenciállal számított értékektől. A köbös és negyedrendű anharmonikus tagokat véve csak figyelembe a potenciális energia sorfejtésében, *Vo Hong Anh* [82] megmutatta, hogy modellünk esetében a (4.1.20), illetve a (4.1.21) potenciál felhasználásával a fenti paraméter-megválasztás mellett számított mennyiségek gyakorlatilag nem különböznek egymástól. A továbbiakban ezért a (4.1.20) Morse-potenciált az $ar_0=6$ paraméter-megválasztással fogjuk használni.

A (4.1.20) Morse-potenciál felhasználásával a (4.1.12) self-consistens potenciálra a

$$\tilde{\varphi}(l) \approx \epsilon \left\{ e^{-2ar_0\left(\frac{l}{r_0}-1\right)} e^{2y} - 2e^{-ar_0\left(\frac{l}{r_0}-1\right)} e^{y/2} \right\} \quad (4.1.22)$$

közelítő kifejezést nyerjük, ahol $y = (f/2\epsilon) \overline{u^2(l)} = (ar_0)^2 [\overline{u^2(l)}/r_0^2]$.

Térjünk most vissza a kristály (4.1.13) self-consistens egyenletére. Az ω szerinti integrálás a (4.1.13) egyenletben a fononok csillapodásának figyelembevétele esetén nem végezhető el analitikusan, hanem csak numerikus eljárást használva gépi úton számítható ki ez az integrál. Ha azonban a tömegoperátornak a magas, illetve az alacsony hőmérsékletek határesetére kiszámított közelítő alakját használjuk fel, akkor e két határesetben közelítő kifejezést nyerhetünk a (4.1.13) egyenletre. Vizsgáljuk most ennek megfelelően külön a magas hőmérsékletek és az alacsony hőmérsékletek határesetét.

a) A magas hőmérsékletek esete ($\theta \gg \omega_D$)

A magas hőmérsékletek határesetében a megfelelő közelítésben a [144] dolgozat eredményeivel egybehangzóan a (4.1.6) tömegoperátorra a

$$\Pi_k(\omega) = -\theta \frac{g^2(\theta, l)}{f^3(\theta, l)} \omega_k S_k(v) \quad (4.1.23)$$

kifejezést nyerjük, ahol $v = \omega/(\omega_L/2)$ és a

$$S_k(v) = \frac{1}{32N} \sum_{p, p'} \frac{\Delta(\vec{p} + \vec{p}' - \vec{k})}{\lambda_k^2 \lambda_p^2 \lambda_{p'}^2} F^2(-k, p, p') \left\{ \frac{(\lambda_p + \lambda_{p'})^2}{(\lambda_p + \lambda_{p'})^2 - v^2} + \frac{(\lambda_p - \lambda_{p'})^2}{(\lambda_p - \lambda_{p'})^2 - v^2} \right\} \quad (4.1.24)$$

dimenzió nélküli rácsösszeget néhány $\{\vec{k}, j\}$ értékre *Maradudin* [144] számította ki. (Lásd a [144] dolgozatban a 2. táblázatot, ahol

$$\text{Re } S_k(\lambda_k) \approx 1,1 \cdot 10^4 C_k^2 [\delta_k/C_k(T/\theta)]$$

$$\text{Im } S_k(\lambda_k + i\delta) \approx 1,1 \cdot 10^4 C_k^2 [\gamma_k/C_k(T/\theta)]$$

$$\omega_{kj} = (\omega_L/2) \lambda_{kj}; \quad \omega_L = \{f(\theta, l)/f\}^{1/2} \omega_{0L}$$

és ω_{0L} a maximális rezgési frekvencia harmonikus közelítésben: $\omega_{0L}^2 = 8f/M$.)

Az effektív köbös anharmonikus járuléka a szabadenergia kifejezéséhez $\theta \gg \omega_D$ esetben [141] dolgozat eredményeivel egybehangzóan

$$\tilde{F}_3(\theta) = -N\theta^2 A \frac{g^2(\theta, l)}{f^3(\theta, l)} \quad (4.1.25)$$

alakban írható fel, ahol $A = 172,3/3072 \approx 5,6 \cdot 10^{-2}$.

A tömegoperátor (4.1.23) alakja felhasználásával a kristály (4.1.13) self-consistens egyenletét közelítőleg

$$\frac{z}{2} f(\theta, l) \overline{u^2(l)} = 3\theta \left\{ \left[1 - \mu\theta \frac{g^2(\theta, l)}{f^3(\theta, l)} \right]^{-1} + \frac{1}{24} \frac{\omega_L^2}{\theta^2} \right\} \quad (4.1.26)$$

alakban írhatjuk fel a magas hőmérsékletek határesetében. A (4.1.26) egyenlet levezetésekor felhasználtuk az

$$\frac{1}{N} \sum_k \omega_k^2 = \omega_L^2/2 \quad (4.1.27)$$

összefüggést [141], és a (2.2.37) összegszabályt.

A (4.1.26) egyenletben szereplő μ numerikus együtthatót kis anharmonicitás esetén könnyen meghatározhatjuk, ha a (4.1.13) egyenletnek egy másik, ekvivalens alakját tekintjük:

$$\frac{z}{2} f(\theta, l) \overline{u^2(l)} = \frac{1}{N} \sum_k \frac{\omega_k}{2} \langle B_k^+ B_k \rangle - \frac{6}{N} \tilde{F}_3(\theta), \quad (4.1.28)$$

ahol felhasználtuk a (2.5.32) összefüggést. A (2.2.37) összegszabály felhasználásával a magas hőmérsékletek határesetében közelítőleg írhatjuk

$$\langle B_k^+ B_k \rangle \approx \frac{2\theta}{\omega_k} \left(1 + \frac{1}{12} \frac{\omega_k^2}{\theta^2} \right), \quad (4.1.29)$$

Ha most behelyettesítjük a (4.1.25) és (4.1.29) kifejezéseket a (4.1.28) egyenletbe, és az így kapott kifejezést összehasonlítjuk a (4.1.26) kifejezéssel, akkor leolvashatjuk, hogy $\mu = 2A \approx 0,11$. A továbbiakban a μ paraméter fenti értékét használjuk tetszőleges anharmonicitás esetén is.

b) Az alacsony hőmérsékletek esete ($\theta \ll \omega_D$)

A tömegoperátor kifejezésében elvégezve a $|p|$ szerinti integrálást, az alacsony hőmérsékletek határesetében a [142] dolgozat eredményével megegyezően a tömegoperátorra a

$$\Pi_k(\omega) = -\omega_k \frac{g^2(\theta, l)}{f^3(\theta, l)} \left\{ \epsilon_0 S_{0k}(v) + \frac{3\pi^4}{5} \frac{\theta^4}{\omega^3} S_{1k}(v) \right\} \quad (4.1.30)$$

kifejezést nyerjük, ahol

$$S_{0k}(v) = \frac{1}{1,02 \cdot 8^2 N} \sum_{p, p'} \frac{D(\vec{p} + \vec{p}' - \vec{k})}{\lambda_k^2 \lambda_p \lambda_{p'}} F^2(-k, p, p') \frac{\lambda_p + \lambda_{p'}}{(\lambda_p + \lambda_{p'})^2 - v^2} \quad (4.1.31)$$

$$S_{1k}(v) = \frac{1}{120,8 \cdot 8^2} \sum_{j_1 j_2} \int_{-1}^1 d(\cos \theta) \int_0^{2\pi} d\varphi \frac{G^2(\vec{k}j; \theta, \varphi, j_1; \vec{k}j_2)}{\lambda_{\vec{k}j}^2 \lambda_{\vec{k}j_2} d_{j_1}^5(\theta, \varphi)} \frac{2\lambda_{\vec{k}j_2}}{\lambda_{\vec{k}j_2}^2 - v^2}$$

dimenzió nélküli rácsösszegek. A tömegoperátor (4.1.30) kifejezésének levezetésekor az

$$\varepsilon_0 = \frac{1}{N} \sum_k \frac{\omega_k}{2} \approx 1,02 \omega_L,$$

$$\omega_D = \omega_L \frac{36\pi^2}{120,8 \cdot 8} \approx 1,05 \omega_L$$

és $|p| \rightarrow 0$ esetben

$$\lambda_{pj_1} \approx p d_{j_1}(\theta, \varphi) d/2, \quad (4.1.32)$$

$$F(\vec{k}j, \vec{p}j_1, \vec{k}j_2) \approx p \frac{d}{4} G(\vec{k}j; \theta, \varphi, j_1, \vec{k}j_2)$$

formulákat és jelöléseket használtuk fel *Maradudin*-nal [142] megegyezően.

Az effektív köbös anharmonikus járuléka a szabadenergia kifejezéséhez $\theta \ll \omega_D$ esetében a [142] dolgozat eredményeihez hasonlóan

$$\hat{F}_3(\theta) = -N\varepsilon_0 \frac{g^2(\theta, l)}{f^3(\theta, l)} \left\{ \varepsilon_0 B + \frac{3\pi^4}{5} \frac{\theta^4}{\omega_D^3} C \right\} \quad (4.1.33)$$

alakban írható fel, ahol a numerikus értékek

$$B = \frac{1,481}{(48) \cdot (16) \cdot (1,02)^2} \approx 1,85 \cdot 10^{-3}; \quad C = \frac{7,86}{(16) \cdot (1,02) \cdot (120,8)} \approx 1,25 \cdot 10^{-2}.$$

A tömegoperátor (4.1.30) alakjának a felhasználásával a kristály (4.1.13) self-consistens egyenletét az alacsony hőmérsékletek határesetében közelítőleg

$$\frac{z}{2} f(\theta, l) \overline{u^2(l)} = \varepsilon_0 \left(1 - v_0 \varepsilon_0 \frac{g^2(\theta, l)}{f^3(\theta, l)} \right)^{-1} + \frac{3\pi^4}{5} \frac{\theta^4}{\omega_D^3} \left(1 + v_1 \varepsilon_0 \frac{g^2(\theta, l)}{f^3(\theta, l)} \right) \quad (4.1.34)$$

alakban írhatjuk fel. Az alacsony hőmérsékletek határesetében a v_0 és v_1 numerikus együtthatók értékét úgy választjuk meg, hogy a nullponti energiára és a fajhőre *Maradudin* [142] eredményeivel megegyező kifejezéseket nyerjük. Így a két numerikus együtthatóra a $v_0 = 4B \approx 7,3 \cdot 10^{-3}$ és $v_1 = 8C \approx 0,10$ értéket nyerjük [vö. (4.2.16)].

A továbbiakban külön fogjuk vizsgálni azt az esetet, amikor a kristály térfogata állandó, és azt az esetet, amikor a kristályra állandó nagyságú nyomás hat.

4.2. Az anharmonikus kristály állandó térfogaton

Vizsgáljuk először azt az esetet, mikor a kristály térfogata állandó. Rögzítsük a kristály térfogatát például úgy, hogy $l=r_0$ legyen. Ebben az esetben a self-consistens potenciál (4.1.22) kifejezését

$$\tilde{\varphi}(y) = \epsilon e^{y/2} \{e^{3y/2} - 2\} \quad (4.2.1)$$

alakban írhatjuk fel. Az $f(\theta, P)$ pszeudoharmonikus és a $g(\theta, P)$ effektív köbös anharmonikus erőállandóra (4.1.9) felhasználásával az

$$f(\theta, P) = f e^{y/2} \{2e^{3y/2} - 1\} \quad (4.2.2)$$

$$g(\theta, P) = \frac{g}{3} e^{y/2} \{4e^{3y/2} - 1\} \quad (4.2.3)$$

kifejezéseket nyerhetjük, ahol $g = \varphi'''(r_0) = -6\epsilon a^3$. A kristály (4.1.14) állapot-egyenletét ebben az esetben

$$P^* = 24e^{y/2} \{e^{3y/2} - 1\} \quad (4.2.4)$$

alakban írhatjuk fe, ahol $P^* = P(\sigma^3/\epsilon)$ — a redukált nyomás.

Amint fentebb láttuk, külön kell vizsgálnunk a két hőmérsékleti határesetet, a magas hőmérsékletek és az alacsony hőmérsékletek esetét.

a) A magas hőmérsékletek esete ($\theta \gg \omega_D$)

Behelyettesítve az erő-állandók (4.2.2) és (4.2.3) kifejezését a (4.1.26) egyenletbe, a magas hőmérsékletek határesetében a kristály tulajdonságait meghatározó self-consistens egyenletet

$$(\lambda_1 y - \beta) (2e^{2y} - e^{y/2}) \left[1 - A \frac{z}{3\lambda_1} e^{-2y} \frac{(4 - e^{-3y/2})^2}{(2 - e^{-3y/2})^3} \right] = 1 \quad (4.2.5)$$

alakban írhatjuk fel, ahol $\lambda_1 = z\epsilon/3\theta = 4\epsilon/\theta = M\omega_{0L}^2/4a^2\theta$ és $\beta = (\omega_{0L}^2/24\theta^2) \ll 1$.

A (4.2.5) egyenletnek minden hőmérsékleten (a λ_1 paraméter minden értéke mellett) van pozitív valós megoldása, vagyis éppen úgy, mint a lineáris lánc korábban tárgyalt esetében, a kristálynak minden hőmérsékleten van stabil állapota.

Itt jegyezzük meg, hogy *Choquard* [69] az állandó térfogaton vizsgált anharmonikus kristály esetében arra az eredményre jutott, hogy az instabilitás jelensége fellép ebben az esetben is. Véleményünk szerint ez az eredmény arra vezethető vissza, hogy a self-consistens potenciál integrál-előállítását használta fel számításában, ami a self-consistens potenciál kifejezésében az $\exp(-1/y)$ típusú tagok felléptére vezet. Az ilyen típusú tagok az atomoknak a potenciálfalon az alagúteffektus következtében történő áthaladását írják le. Ennek az effektusnak a helyes értékelésére azonban a kölcsönhatási potenciál hard-core részét kell következetesen számításba venni. Ennek következtében az állandó térfogatú kristály stabilitásának kérdésére a végleges választ csak azután lehet megadni, ha következetesen figyelembe vesszük számításainkban az atomok rövid hatótávolságú korrelációját, amely a kölcsönhatási potenciál hard-core részével kapcsolatos.

Kis anharmonicitás esetén, amikor $\omega_D \ll \theta \ll \epsilon$, $y \ll 1$ és a (4.2.5) egyenlet megoldását

$$y = \frac{1}{\lambda_1} \left[1 + \beta + \frac{1}{\lambda_1} \left(3zA - \frac{7}{2} \right) \right] \quad (4.2.6)$$

alakban írhatjuk fel. A (4.2.6) megoldás felhasználásával a (4.1.15) renormált fonon frekvenciára és a fononok csillapodására, a kristály (4.1.6) belső energiájára az

$$\epsilon_{\bar{k}j} = \omega_{0\bar{k}j} \left\{ 1 + \frac{\theta}{8} \frac{h}{f^3} (1 + \beta) - \theta \frac{g^2}{f^3} \operatorname{Re} S_{\bar{k}j} \right\} \quad (4.2.7)$$

$$\Gamma_{\bar{k}j} = \theta \frac{g^2}{f^3} \omega_{0\bar{k}j} \operatorname{Im} S_{\bar{k}j} \quad (4.2.8)$$

$$\frac{1}{N} E = -\frac{z\epsilon}{2} + 3\theta \left\{ 1 + \beta - \theta \left(\frac{1}{16} \frac{h}{f^2} - \frac{A}{3} \frac{g^2}{f^3} \right) \right\} \quad (4.2.9)$$

képleteket nyertük, ahol bevezettük a $h = \varphi^{(IV)}(r_0)$; $\operatorname{Re} S_{\bar{k}j} \equiv \operatorname{Re} S_{\bar{k}j}(\lambda_{\bar{k}j})$; $\operatorname{Im} S_{\bar{k}j} \equiv \operatorname{Im} S_{\bar{k}j}(\lambda_{\bar{k}j} + i\delta)$ jelöléseket. A (4.2.7)–(4.2.9) kifejezések és az állandó térfogaton mért fajhőre $c_v = (k/N)(\partial E / \partial \theta)$ levezethető formula megegyezik a [141], [144] dolgozatokban nyert perturbációs sorfejtések első tagjaival. A (4.2.4) és (4.2.6) kifejezések felhasználásával a nyomásra, amely szükséges ahhoz, hogy a kristályt állandó térfogaton tartsuk, az alábbi formulát nyerjük:

$$P^* = 9 \frac{\theta}{\epsilon} \left\{ 1 + \beta - \theta \left(\frac{9}{56} \frac{h}{f^2} - 2A \frac{g^2}{f^3} \right) \right\} \quad (4.2.10)$$

b) Az alacsony hőmérsékletek esete ($\theta \ll \omega_D$)

Behelyettesítve az erőállandók (4.2.2) és (4.2.3) kifejezését a (4.1.26) egyenletbe, a kristály tulajdonságait az alacsony hőmérsékletek határesetében meghatározó self-consistens egyenlet

$$\begin{aligned} & \lambda y (2e^{2y} - e^{y/2}) \left[1 - \frac{z}{2\lambda} v_0 e^{-y} \frac{(4 - e^{-3y/2})^2}{(2 - e^{-3y/2})^{5/2}} \right] = \\ & = 1 + \eta (2e^{2y} - e^{y/2})^{-2} \left[1 + (v_1 - v_0) \frac{z}{2\lambda} e^{-y} \frac{(4 - e^{-3y/2})^2}{(2 - e^{-3y/2})^{5/2}} \right] \end{aligned} \quad (4.2.11)$$

alakban írható, ahol $\lambda = z\epsilon / \epsilon_0^{(0)}$ —a rács atomjainak a dimenzió nélküli kötési paramétere, $\epsilon_0^{(0)} \approx 1,02 \omega_{0L}$ az atom nullponti energiája harmonikus közelítésben és $\eta = (3\pi^4/5)(\theta^4/\omega_{0D}^4)$.

A (4.2.11) egyenletnek a λ paraméter tetszőleges értéke mellett van $y > 0$ valós megoldása, vagyis a helyzet ugyanaz, mint a magas hőmérsékletek határesetében, illetve a lineáris lánc esetében. Itt is hivatkozni szeretnénk a magas hőmérsékletek határesetének tárgyalásakor tett megjegyzésünkre.

A perturbációszámítás szokásos módszereivel azt az esetet vizsgálják, amikor az anharmonicitás kicsiny, vagyis amikor $\varepsilon_0^{(0)} \ll z\epsilon$, ekkor $y \ll 1$ és a (4.2.11) egyenlet megoldását

$$y = \frac{1}{\lambda} \left\{ 1 + \eta - \frac{1}{\lambda} \left[\left(\frac{7}{4} - \frac{9z}{2} v_0 \right) + \eta \left(\frac{21}{2} - \frac{9z}{2} v_1 \right) \right] \right\} \quad (4.2.12)$$

alakban írhatjuk fel. A (4.2.12) megoldás felhasználásával az alacsony hőmérsékletek határesetében kiszámíthatjuk a renormált frekvenciát, a csillapodást és a kristály belső energiáját:

$$\epsilon_{kj} = \omega_{0kj} \left\{ 1 + \varepsilon_0^{(0)} \left[\frac{1}{24} \frac{h}{f^2} (1 + \eta) - \frac{g^2}{f^3} (\text{Re } S_{0kj} + \eta \text{Re } S_{1kj}) \right] \right\} \quad (4.2.13)$$

$$\Gamma_{kj} = \omega_{0kj} \varepsilon_0^{(0)} \frac{g^2}{f^3} [\text{Im } S_{0kj} + \eta \text{Im } S_{1kj}] \quad (4.2.14)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} E = & -\frac{z\epsilon}{2} + \varepsilon_0^{(0)} \left\{ 1 + \varepsilon_0^{(0)} \left(\frac{1}{48} \frac{h}{f^2} - \frac{g^2}{f^3} [5B - v_0] \right) + \right. \\ & \left. + \eta \left[1 - \varepsilon_0^{(0)} \left(\frac{1}{8} \frac{h}{f^2} - \frac{g^2}{f^3} [v_1 - 5C] \right) \right] \right\} \end{aligned} \quad (4.2.15)$$

Könnyen meggyőződhetünk arról, hogy a paraméterek megfelelő megválasztása: $v_0 = 4B$ és $v_1 = 8C$ esetében a belső energiára és az állandó térfogaton mért fajhőre $c_v = (k/N)(\partial E / \partial \theta)$ nyert kifejezésünk megegyezik a [142] dolgozatban a perturbációszámítás szokásos módszereinek alkalmazásával nyert eredményekkel. A nyomásra az alacsony hőmérsékletek határesetében a (4.2.12) megoldás felhasználásával a

$$P^* = 3 \frac{\varepsilon_0^{(0)}}{\epsilon} \left\{ 1 + \varepsilon_0^{(0)} \left(\frac{1}{84} \frac{h}{f^2} - \frac{g^2}{f^3} v_0 \right) + \eta \left[1 - \varepsilon_0^{(0)} \left(\frac{4}{21} \frac{h}{f^2} - \frac{g^2}{f^3} v_1 \right) \right] \right\} \quad (4.2.16)$$

kifejezést nyerjük. Megjegyezzük, hogy a nyomás $\theta = 0^\circ \text{K}$ hőmérsékleten ($\eta = 0$) is zérustól különböző az atomok nullponti rezgései következtében.

4.3. Az anharmonikus kristály állandó nyomáson

Vizsgáljuk most azt az esetet, amikor a kristályra állandó nyomás hat: $P = \text{const}$. Ebben az esetben az atomok egyensúlyi távolságát célszerű

$$l(\theta) = l_0 + \delta l = r_0 \left\{ 1 + \frac{1}{4} y + \frac{\delta l}{r_0} \right\} \quad (4.3.1)$$

alakban felírni, ahol l_0 az egyensúlyi távolság $P = 0$ esetében, amelyet a kristály (4.1.14) állapotegyenletének felhasználásával határozhatunk meg. A kristály (4.1.14) állapotegyenletét (4.3.1) felhasználásával

$$P^* = \frac{24}{(l/r_0)^2} e^{-y} e^{-6 \frac{\delta l}{r_0}} \{ e^{-6 \frac{\delta l}{r_0}} - 1 \} \quad (4.3.2)$$

alakban írhatjuk fel, ahol $P^* = P(\sigma^3/\epsilon)$ -a redukált nyomás.

A frekvencia pszeudoharmonikus renormálási tényezőjére (4.1.22), (4.3.1) és (4.3.2) felhasználásával a (4.1.9) kifejezés alapján az

$$\alpha^2 = \frac{f(\theta, l)}{f} = \frac{P^*}{12} \left(\frac{l}{r_0} \right)^2 + \frac{e^{-y}}{2} (1 + \gamma) \quad (4.3.3)$$

formulát nyerjük, ahol

$$\gamma = \left\{ 1 + \frac{P^*}{6} \left(\frac{l}{r_0} \right)^2 e^y \right\}^{1/2} \quad (4.3.4)$$

A (4.3.3) egyenletből kifejezhetjük az atomok relatív elmozdulása négyzetes középértékének a dimenzió nélküli mértékét

$$y = \frac{\alpha^2 - \frac{P^*}{24} \left(\frac{l}{r_0} \right)^2}{\left[\alpha^2 - \frac{P^*}{12} \left(\frac{l}{r_0} \right)^2 \right]^2} \quad (4.3.5)$$

A fentiek felhasználásával a (4.1.22) self-consistens potenciált, az atomok (4.3.1) egyensúlyi távolságát, az (4.1.9) effektív köbös anharmonikus erőállandót az alábbi kifejezésekkel adhatjuk meg:

$$\tilde{\varphi}(l) = -\epsilon \left\{ \alpha^2 - \frac{P^*}{8} \left(\frac{l}{r_0} \right)^2 \right\} = -\epsilon \left\{ \frac{e^{-y}}{2} (1 + \gamma) - \frac{P^*}{24} \left(\frac{l}{r_0} \right)^2 \right\} \quad (4.3.6)$$

$$l = r_0 \left\{ 1 + \frac{1}{24} \ln \frac{\alpha^2 - \frac{P^*}{24} \left(\frac{l}{r_0} \right)^2}{\left[\alpha^2 - \frac{P^*}{12} \left(\frac{l}{r_0} \right)^2 \right]^4} \right\} = r_0 \left\{ 1 + \frac{1}{4} y - \frac{1}{6} \ln \frac{1 + \gamma}{2} \right\} \quad (4.3.7)$$

$$g(\theta, l) = g \left\{ \alpha^2 - \frac{P^*}{36} \left(\frac{l}{r_0} \right)^2 \right\} = g \left\{ \frac{P^*}{18} \left(\frac{l}{r_0} \right)^2 + \frac{e^{-y}}{2} (1 + \gamma) \right\} \quad (4.3.8)$$

Ha a kristályra ható nyomás kicsiny: $P^* \ll 1$, a fent levezetett formulák egyszerűbb alakot öltenek, és a számításokat analitikus módszerekkel végezhetjük el. Ezért előállítjuk az analitikus számításokhoz szükséges formulákat is $P^* \ll 1$ esetére. Elvégezve a szükséges számításokat a $P^* \ll 1$ feltétel figyelembevételével a $f(\theta, l)$ pszeudoharmonikus és a $g(\theta, l)$ effektív köbös anharmonikus erőállandóra az

$$f(\theta, l) = f \{ e^{-y} + p \}; \quad g(\theta, l) = g \left(e^{-y} + \frac{7}{9} p \right) \quad (4.3.9)$$

kifejezést nyerjük, ahol

$$p = \frac{P^*}{8} \left(\frac{l}{r_0} \right)^2 \approx \frac{P^*}{8} \left(\frac{l_0}{r_0} \right)^2 \quad (4.3.10)$$

a nyomás dimenzió nélküli mértéke. Ebben az esetben az atomok egyensúlyi távolságát az

$$l = r_0 \left\{ 1 + \frac{1}{4} y - \frac{P^*}{144} \left(\frac{l_0}{r_0} \right)^2 e^y \right\} \quad (4.3.11)$$

képlet segítségével számíthatjuk ki.

A továbbiakban külön kell vizsgálnunk a magas hőmérsékletek és az alacsony hőmérsékletek határeseteit. Mindkét hőmérsékleti határesetben a numerikus gépi számításokon kívül a kis nyomások esetében néhány fizikai mennyiségre analitikus alakban előállított formulát is levezetünk a továbbiakban.

a) A magas hőmérsékletek esete ($\theta \gg \omega_D$)

A kristály (4.1.26) self-consistens egyenletét (4.3.3) és (4.3.8) figyelembevételével átírhatjuk

$$\alpha^2 y(\alpha) = \frac{T^*}{4} \left\{ \left[1 - \frac{9}{2} 2AT^* \frac{\left[\alpha^2 - \frac{P^*}{36} \left(\frac{l}{r_0} \right)^2 \right]}{\alpha^6} \right]^{-1} + \frac{(11,76)^2}{24} \left(\frac{\alpha}{\lambda T^*} \right)^2 \right\} \quad (4.3.12a)$$

alakba, illetve további átalakításokat végezve, a kristály (4.1.26) self-consistens egyenletét közelítőleg

$$F(y) = \left\{ 1 - \left[\frac{P^* \left(\frac{l}{r_0} \right)^2}{3T^*} - B \right] y \right\}^2 e^y - \frac{4y}{T^*} \left\{ 1 - \left[\frac{P^* \left(\frac{l}{r_0} \right)^2}{6T^*} - B \right] y \right\} = 0 \quad (4.3.12)$$

alakban írhatjuk fel, ahol $T^* = \theta/\epsilon$ — a redukált hőmérséklet, $B = 0,22 \{2 + 1/\gamma\}^2$. Célszerű továbbá bevezetni a hőmérséklet dimenzió nélküli mértékét $\tau = \theta/\omega_{0L} = \lambda T^*/11,76$, ahol $\lambda = z\epsilon/\epsilon_0^{(0)}$ a kristály atomjainak a dimenzió nélküli kötési paramétere, $\epsilon_0^{(0)} \approx 1,02\omega_{0L}$ az egy atomra vonatkoztatott nullponti energia a harmonikus közelítésben. Megjegyezzük, hogy a (4.3.12) self-consistens egyenlet analóg felépítésű, mint a lineáris lánc esetében nyert (3.6.4) egyenlet, ennek megfelelően e két egyenlet megoldásai is analóg tulajdonságokkal rendelkeznek.

A (4.3.12) self-consistens egyenletet numerikusan, gépi számítással oldottuk meg. Megjegyezzük, hogy a (4.3.12) egyenletnek P^* és T^* értékétől függően különböző számú valós megoldása van. „Fizikai” megoldásnak azt a megoldást fogjuk nevezni, amelyik egybeesik a harmonikus feladat megoldásával, ha az anharmonikus tagok a nullához tartanak. A harmonikus feladat megoldása, mint az könnyen belátható

$$y_h = \frac{T^*}{4x_h^2} = \frac{T^*}{2 \left\{ 1 + \frac{P^*}{6} \left(\frac{l}{r_0} \right)_h^2 + \sqrt{1 + \frac{P^*}{6} \left(\frac{l}{r_0} \right)_h^2} \right\}} \quad (4.3.13)$$

alakban írható fel. A kristály (4.3.12) self-consistens egyenlete „fizikai” megoldásait a P^* redukált nyomás és a T^* redukált hőmérséklet függvényében a 4.1. ábrán mutatjuk be. Ha a nyomás ($P^* < P_c^*$) és a hőmérséklet [$T^* \leq T_s^*(P^*)$] eléggé kicsi, a (4.3.12) self-consistens egyenletnek vannak valós megoldásai, amelyek közül a legkisebb, $y_1 > 0$ a „fizikai” megoldás. Az y_1 megoldás a kristály S_1 stabil állapotához tartozik. A $T_s^*(P^*)$ instabilitási hőmérsékletet két valós megoldás egybeesése $y_1(T_s^*) = y_2(T_s^*)$ határozza meg, következésképpen a $F(y) = 0$ és a $F'(y) = 0$ egyenletrendszer megoldása szolgáltatja. Az y_2 megoldás egy S_2 instabil állapotnak felel meg, amelyet ábráinkon a szaggatott vonal jelöl. A $T^* > T_s^*(P^*)$ esetében az y_1 és y_2 megoldások egy komplex konjugált megoldaspárrá válnak, ennek következtében a fónok frekvenciái is komplex mennyiséggé válnak, ami az y_1 megoldásnak megfelelő

S_1 állapot rezgési instabilitását jelenti. Lényeges megjegyeznünk, hogyha $P^* > 0$, akkor a $T^* > T_s^*$ tartományban a (4.3.12) self-consistens egyenletnek van egy másik, $y_3 > 0$ valós megoldása, amelyik egy második S_3 stabil állapotnak felel meg.

Ha a nyomás, illetve a hőmérséklet elég nagy: $P^* \geq P_c^*$ vagy $T^* \geq T_c^*$, a (4.3.12) self-consistens egyenletnek mindig van két valós megoldása, amelyek közül a kisebbik a „fizikai” megoldás. Ebben az esetben a fononok frekvenciái mindig valósak, az instabilitás jelensége nem lép fel. A T_c^* kritikus hőmérsékletet és a P_c^* kritikus nyomást a kristály rezgési instabilitásának a megszűnése jellemzi, e két mennyiséget három valós gyök $y_1(T_c^*, P_c^*) = y_2(T_c^*, P_c^*) = y_3(T_c^*, P_c^*)$ egybeesése határozza meg, következésképpen a $F(y) = F'(y) = F''(y) = 0$ egyenletrendszer megoldása szolgáltatja.

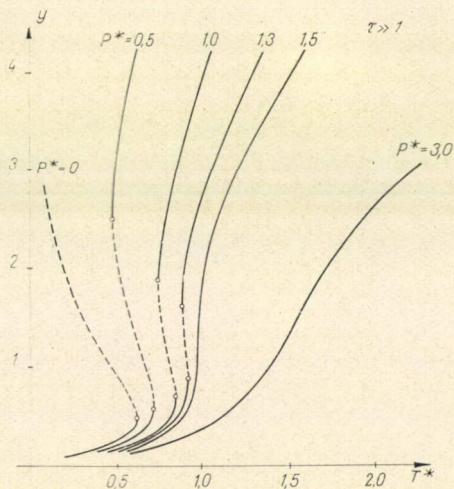
A redukált instabilitási hőmérséklet függését a redukált nyomástól a 4.2. ábrán szemléltettük. A 4.2. ábrán a nemesgáz kristályok redukált olvadáspont görbéjét $T_m^* = 0,5 \{1 + 0,2P^*\}$ [147] alapján a szaggatott vonallal ábrázoltuk. A magas hőmérsékletek határesetében a kritikus nyomásra a $P_c^* \approx 1,35$ és a kritikus hőmérsékletre a $T_c^* \approx 0,98$ értéket nyertük.

A renormált fonon frekvenciákat és a fononok csillapodását (4.1.15)-nek megfelelően (4.3.3), (4.3.4), (4.3.8) és (4.1.23) figyelembevételével

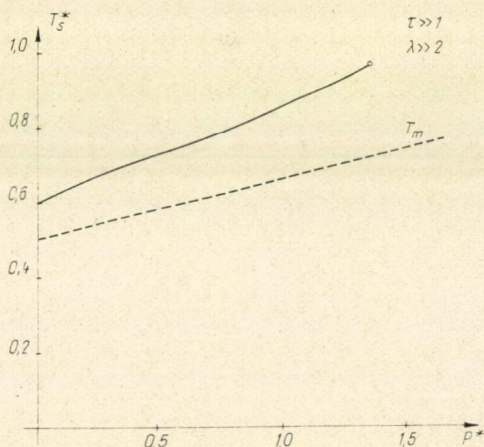
$$\frac{\epsilon_k}{\omega_{0k}} = \alpha - \frac{3}{2} \cdot 10^{-2} \frac{T^*}{\alpha} (2 + 1/\gamma)^2 \quad (4.3.14)$$

$$\frac{\Gamma_k}{\omega_{0k}} = \frac{1}{2} \cdot 10^{-2} T^* \frac{1}{\alpha} (2 + 1/\gamma)^2 \quad (4.3.15)$$

alakban írhatjuk fel. Számításainkban a $\text{Re } S_k \approx 3 \cdot 10^{-2}$ és $\text{Im } S_k \approx 1 \cdot 10^{-2}$ érté-

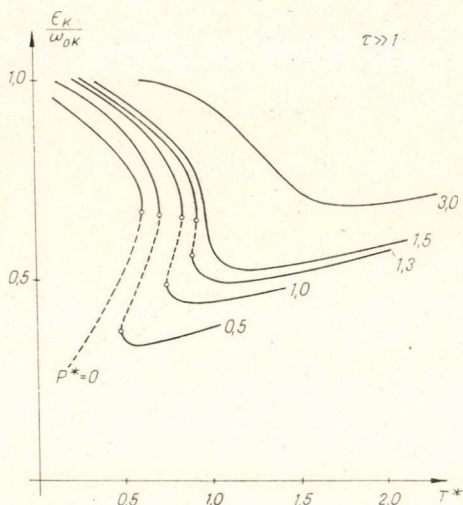


4.1. ábra. Az erősen kötött ($\lambda \gg \lambda_0 \approx 2,2$) anharmonikus kristály self-consistens egyenletének megoldásai a T^* redukált hőmérséklet függvényében a P^* redukált nyomás különböző értékei mellett ($\theta \gg \omega_D$)

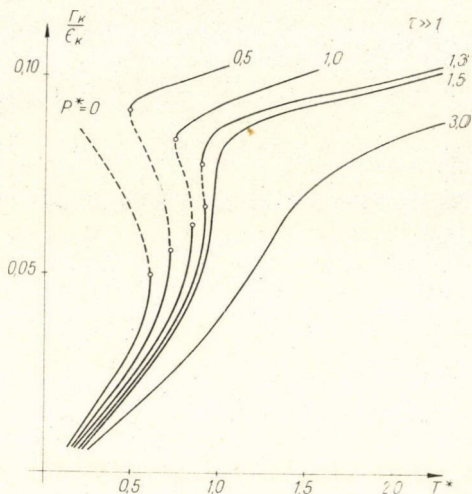


4.2. ábra. Az erősen kötött ($\lambda \gg \lambda$) kristály T_s^* redukált instabilitási hőmérséklete a P^* redukált nyomás függvényében ($\theta \gg \omega_D$). A nemesgáz kristályok T_m^* redukált olvadási hőmérsékletét a P^* redukált nyomás függvényében [147] alapján a szaggatott vonal ábrázolja

keket használtuk. A 4.3. ábrán a renormált fonon frekvenciák $\epsilon_k/\omega_{0k}(P=0)$ függését a redukált T^* hőmérséklettől a P^* redukált nyomás néhány értéke esetén ábrázoltuk, míg a 4.4. ábrán a Γ_k/ϵ_k mennyiség hőmérsékletfüggését láthatjuk.



4.3. ábra. A self-consistens fononok $\epsilon_{kj}/\omega_{0kj}$ frekvenciája a T^* redukált hőmérséklet függvényében a $\{k, j\}$ értékpár egy adott értéke mellett ($\lambda \gg \lambda_0$; $\theta \gg \omega_D$)



4.4. ábra. A self-consistens fononok $\Gamma_{kj}/\epsilon_{kj}$ csillapodása a T^* redukált hőmérséklet függvényében a $\{k, j\}$ értékpár egy adott értéke mellett ($\lambda \gg \lambda_0$; $\theta \gg \omega_D$)

A belső energia (4.1.16) és a szabadenergia (4.1.17) kifejezéseit a magas hőmérsékletek határesetében

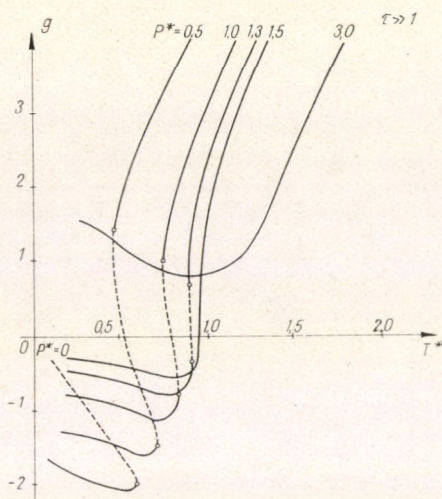
$$e = \frac{1}{3N\epsilon} E = 0,85 T^* - 2x^2(1 + 0,7y) + \frac{P^*}{4} \left(\frac{l}{r_0} \right)^2 \quad (4.3.16)$$

$$f = \frac{1}{3N\epsilon} F = T^* \ln \frac{7,8}{\lambda} \frac{\alpha}{T^*} - \frac{T^*}{3} - 2x^2 \left(1 + \frac{1}{3}y \right) + \frac{P^*}{4} \left(\frac{l}{r_0} \right)^2 \quad (4.3.17)$$

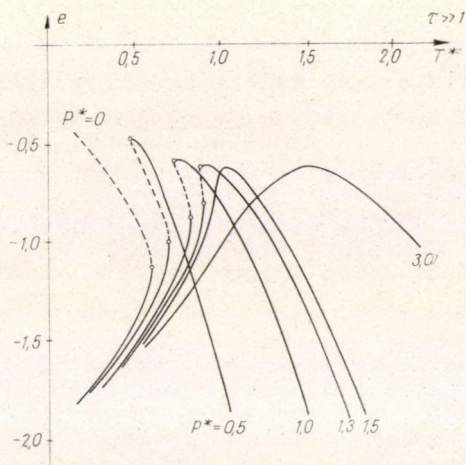
alakban írhatjuk fel, ahol a (4.3.6), (4.1.26), (4.1.25) kifejezéseket vettük figyelembe, továbbá azt, hogy a (4.1.18) kifejezés a magas hőmérsékletek határesetében

$$F_0 = 3N\theta \ln [0,65 (\omega_L/\theta)] \quad (4.3.18)$$

alakban írható. A numerikus számításoknál a szabadenergia (4.3.17) kifejezésében a $\lambda = 20$ értéket vettük. A 4.5. ábrán a redukált termodinamikai potenciált $g = f + P^*v^*$ ábrázoltuk, mint a redukált hőmérséklet függvényét. Mint érdekességet megjegyezzük, hogy a $g(T^*)$ függvénynek minimuma van a T_s^* hőmérsékletnél valamivel alacsonyabb hőmérséklet esetén. A redukált belső energia hőmérsékletfüggését a 4.6. ábrán mutatjuk be. Megjegyezzük, hogy a belső energia csökkenése a hőmérséklet nö-



4.5. ábra. A kristály $g = 1/3N \epsilon (F + 3PV)$ termodinamikai potenciálja a T^* redukált hőmérséklet függvényében ($\lambda \gg \lambda_0$; $\theta \gg \omega_D$)



4.6. ábra. A kristály $e = (1/3N \epsilon) E$ belső energiája a T^* redukált hőmérséklet függvényében ($\lambda \gg \lambda_0$; $\theta \gg \omega_D$)

vekedésekor az S_3 állapotban nem jelentkezik a pseudoharmonikus közelítésben és az alacsony hőmérsékletek határesetében. Mindkét esetben a belső energia a hőmérséklet növekvő függvénye és van der Waals-görbe jellegű viselkedést mutat.

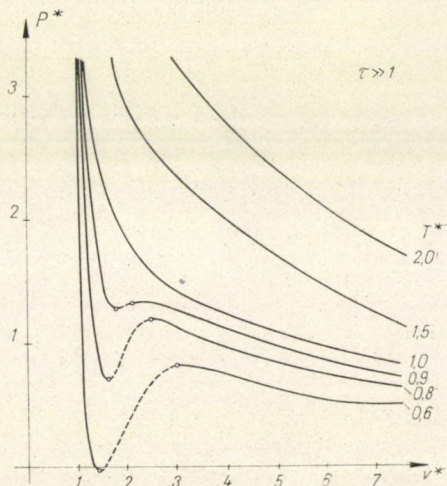
A $v^* = V\sqrt{2}/Nr_0^3 = (l/r_0)^3$ redukált térfogatot, mint a P^* redukált nyomás függvényét a 4.7. ábrán mutatjuk be. Lényeges megjegyeznünk, hogy a kapott görbe van der Waals-görbe jellegű viselkedést mutat. Megjegyezzük, hogy a redukált térfogat nyomásfüggését illetően analóg eredményt találhatunk a [83] dolgozatban is.

α) Kis nyomás $P^* \ll 1$ esete.

Vizsgáljuk meg most azt az esetet, amikor a kristályra kis nyomás hat: $P^* \ll 1$. Behelyettesítve ekkor a (4.3.9) kifejezéseket a (4.1.26) egyenletbe, a kristály self-consistens egyenletét

$$(\lambda_1 y - \beta) \left[1 - \frac{3zA}{\lambda_1} e^y + p e^y \left(1 + \frac{4zA}{3\lambda_1} e^y \right) \right] = e^y \quad (4.3.19)$$

alakban írhatjuk fel, ahol $\lambda_1 = z\epsilon/3\theta$ és $\beta = (\omega_{0L}^2/24\theta^2)$. A (4.3.19) egyenletnek valós megoldása akkor van, ha $\theta \leq \theta_s$. A T_s^* re-



4.7. ábra. A kristály $v^* = (l/r_0)^3$ redukált térfogata, mint a P^* redukált nyomás függvénye ($\lambda \gg \lambda_0$; $\theta \gg \omega_D$)

dukált instabilitási hőmérsékletre a

$$T_s^* = \frac{\theta_s}{\epsilon} = 0,6\{1 + 0,3P^* - 0,15\beta_s\} \quad (4.3.20)$$

kifejezést nyerjük, ahol (4.3.10) és (4.3.11) figyelembevételével $P^* \approx 6,3p$, ha $T^* \approx T_s^*$. A (4.3.19) self-consistens egyenlet megoldását az instabilitási hőmérséklet közelében ($\tau = \theta/\theta_s \leq 1$)

$$y \approx 0,5\{1 + 0,26P^* + 0,3\beta_s - 1,63\sqrt{1-\tau}\} \quad (4.3.21)$$

alakban írhatjuk fel. A (4.1.15) renormált fonon frekvenciákra $\tau \lesssim 1$ esetében az

$$\epsilon_{kj} = 0,77\omega_{0kj}\{1 + 0,4\sqrt{1-\tau} + 0,16(1-\tau) + 0,06P^* - 4,5\tau S'_{kj}\} \quad (4.3.22)$$

kifejezést nyerjük. Láthatjuk, hogy mind (4.3.21), mind (4.3.22) komplex értékre vezet, ha $\tau > 1$, ami a kristályrács rezgési instabilitását jelenti. A self-consistens fononok csillapodását az instabilitási hőmérséklet közelében a

$$\Gamma_{kj}(\omega_{kj}) = \omega_{0kj}\theta \frac{g^2}{f^3} e^{y/2} S''_{kj} \approx 3,5\omega_{0kj}\tau S''_{kj} \quad (4.3.23)$$

képlet adja meg, amelyikből a $(\Gamma_{kj}/\epsilon_{kj}) \approx 10^{-1}$ nagyságrend adódik. (A formulák egyszerűsítése céljából bevezettük a

$$S'_{kj} \equiv \text{Re } S_{kj}(\lambda_{kj}) \quad \text{és} \quad S''_{kj} \equiv \text{Im } S_{kj}(\lambda_{kj} + i\delta)$$

jelöléseket.)

A kristály atomjainak a (4.3.11) egyensúlyi távolsága és ezzel együtt természetesen a kristály térfogata, valamint (4.1.26) belső energiája, amelyet $\theta \lesssim \theta_s$ esetében az

$$\frac{1}{N} E = -\frac{z\epsilon}{2} + 3\theta_s\{1,9 - 0,1P^* + 0,8\beta_s - 2,1\sqrt{1-\tau} - (1-\tau)\} \quad (4.3.24)$$

képlet fejez ki, véges marad, ha $T^* \rightarrow T_s^*$. De a lineáris hőtágulási együttható

$$\alpha_T = \frac{k}{l} \left(\frac{\partial l}{\partial \theta} \right)_p \approx k \frac{3}{2al\theta_s} \frac{0,4}{\sqrt{1-\tau}}, \quad (4.3.25)$$

és az állandó nyomáson mért fajhő

$$C_p = \frac{k}{N} \left[\frac{\partial}{\partial \theta} (E + 3PV) \right]_p \approx 3k \left(1 + \frac{1}{\sqrt{1-\tau}} \right) \quad (4.3.26)$$

a végtelenhez tart, ha $T^* \rightarrow T_s^*$.

Kis anharmonicitás esetén, amikor is $\omega_D \ll \theta \ll \epsilon$ a (4.3.19) self-consistens egyenlet megoldása $y \ll 1$, és a megoldás

$$y = \frac{1}{\lambda_1} \left\{ 1 - \frac{P^*}{8} + \beta + \theta \left[\frac{1}{14} \frac{h}{f^2} + 2A \frac{g^2}{f^3} \right] \right\} \quad (4.3.27)$$

alakban írható, ahol $P^* \approx 8p$, ha $y \ll 1$. A (4.3.27) megoldás segítségével a fizikai mennyiségekre az

$$\epsilon_{kj} = \omega_{0kj} \left\{ 1 + \frac{P^*}{16} - \theta \left[\frac{1}{28} \frac{h}{f^2} (1 + \beta) + \frac{g^2}{f^3} S'_{kj} \right] \right\} \quad (4.3.28)$$

$$\Gamma_{kj} = \omega_{0kj} \frac{g^2}{f^3} \theta S''_{kj} \quad (4.3.29)$$

$$\frac{1}{N} E = -\frac{z\epsilon}{2} + 3\theta \left[1 - \frac{P^*}{16} + \beta + \theta \left(\frac{1}{56} \frac{h}{f^2} + \frac{A}{3} \frac{g^2}{f^3} \right) \right] \quad (4.3.30)$$

$$C_p = 3k \left\{ 1 - \beta + \theta \left(\frac{1}{28} \frac{h}{f^2} + \frac{2A}{3} \frac{g^2}{f^3} \right) \right\} \quad (4.3.31)$$

$$\alpha_T = k \frac{3}{8al\epsilon} \left\{ 1 - \beta - \frac{11}{72} P^* + \theta \left(\frac{1}{7} \frac{h}{f^2} + 4A \frac{g^2}{f^3} \right) \right\} \quad (4.3.32)$$

formulákat vezethetjük le.

Megjegyezzük, hogy a numerikus számítások eredményei és az analitikus alakban levezetett formuláink a megfelelő esetekben igen jó megegyezést mutatnak.

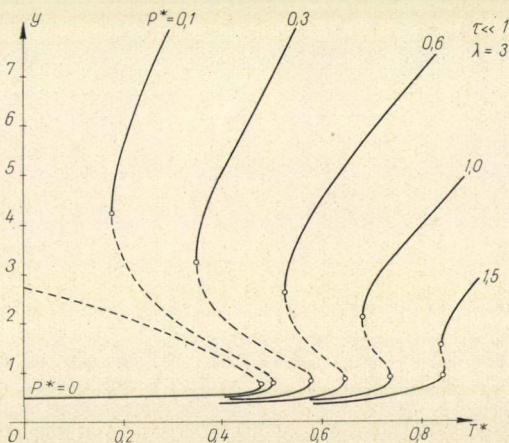
b) Az alacsony hőmérsékletek esete ($\theta \ll \omega_D$)

A kristály (4.1.34) self-consistens egyenletét (4.3.3) és (4.3.8) kifejezések figyelembevételével az alacsony hőmérsékletek határesetében

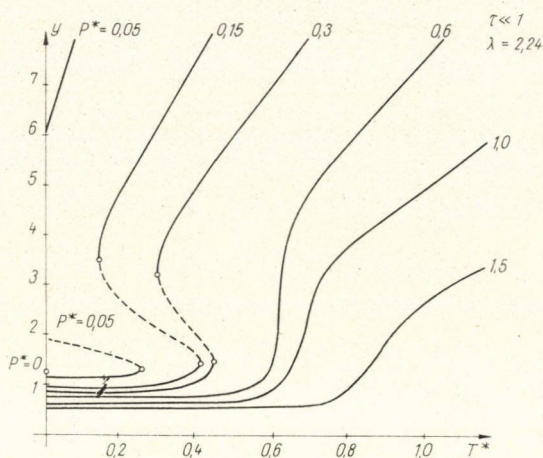
$$\lambda \propto y(\alpha) = \left\{ 1 - \frac{0,4}{\lambda} \frac{\left[\alpha^2 - \frac{P^*}{36} \left(\frac{l}{r_0} \right)^2 \right]^2}{\alpha^5} \right\}^{-1} + 49,6 \left(\frac{\tau}{\alpha} \right)^4 \left\{ 1 + \frac{5,4}{\lambda} \frac{\left[\alpha^2 - \frac{P^*}{36} \left(\frac{l}{r_0} \right)^2 \right]^2}{\alpha^5} \right\} \quad (4.3.33)$$

alakban írhatjuk fel, ahol az $y(\alpha)$ függvényt a (4.3.5) és (4.3.7) kifejezések határozzák meg.

Az alacsony hőmérsékletek határesetében a gyengén kötött kristályok tanulmányozása bizonyul érdekesnek, ezért ezt az esetet fogjuk most vizsgálni. A (4.3.33) self-consistens egyenlet valós gyökeinek hőmérséklet- és nyomásfüggését $\lambda=3$ esetében a 4.8. ábrán, $\lambda=2,24$ esetében a 4.9. ábrán és $\lambda=2$ esetében a 4.10. ábrán láthatjuk. Ha $\lambda > \lambda_s =$



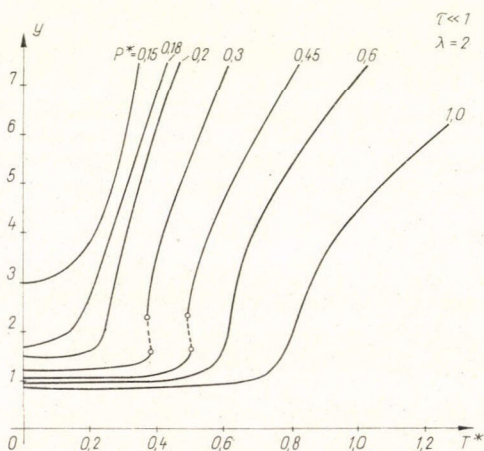
4.8. ábra. A gyengén kötött ($\lambda=3$) anharmonikus kristály self-consistens egyenletének megoldásai a T^* redukált hőmérséklet függvényében a P^* redukált nyomás különböző értékei mellett ($\theta \ll \omega_D$).



4.9. ábra. A gyengén kötött ($\lambda=2,24$) anharmonikus kristály self-consistens egyenletének megoldása a T^* redukált hőmérséklet függvényében a P^* redukált nyomás különböző értékei mellett ($\theta \ll \omega_D$)

nyomásértéknél megjelenik a stabil állapot, amelyik a továbbiakban azután már olyan viselkedést mutat, mint amilyennel megismerkedtünk már a $\lambda > \lambda_s$ esetben. Ezt a helyzetet láthatjuk a 4.10. ábrán.

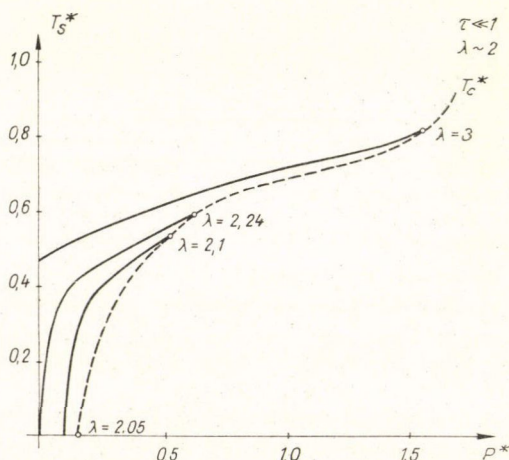
A T_s^* instabilitási hőmérsékletet, mint a P^* redukált nyomás függvényét $\lambda \sim \lambda_s$ esetében a 4.11. ábrán mutatjuk be. $\lambda=3$ esetében a kritikus nyomásra a $P_c^* \approx 1,5$ és a kritikus hőmérsékletre a $T_c^* \approx 0,82$ értéket kaptuk.



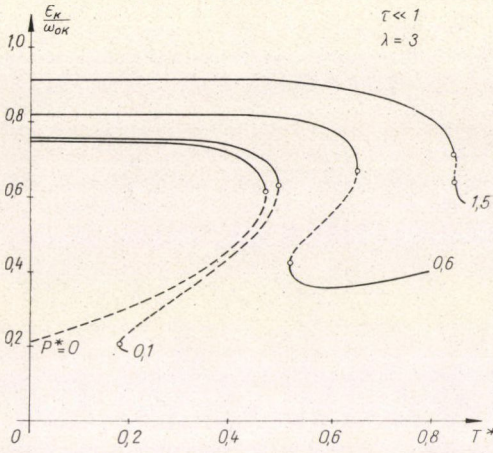
4.10. ábra. A gyengén kötött ($\lambda=2,0$) anharmonikus kristály self-consistens egyenletének megoldásai a T^* redukált hőmérséklet függvényében a P^* redukált nyomás különböző értékei mellett ($\theta \gg \omega_D$)

$= 2,24$ a (4.3.33) egyenlet megoldásai (lásd 4.8. ábra) hasonló tulajdonságokkal rendelkeznek, mint a magas hőmérsékletek határesetében érvényes (4.3.12) self-consistens egyenlet megoldásai (lásd 4.1. ábra). Ezért nem ismételjük meg a (4.3.12) egyenlet gyökeivel kapcsolatban dolgozatunk 4.3. pontja a) alpontjában részletesen kifejtett diszkussziót.

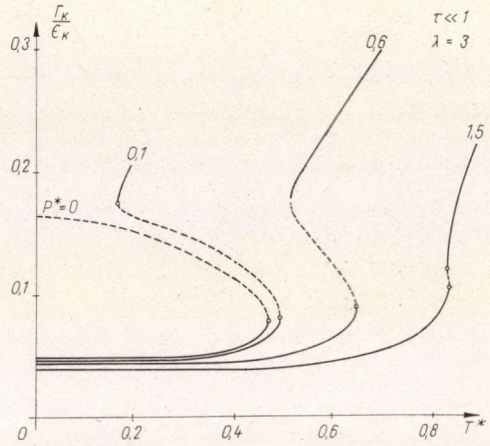
Ha viszont a kötési paraméter meglehetősen kicsi: $\lambda < \lambda_s$, a kristálynak nincs stabil állapota még a $\tau=0$ hőmérsékleten sem, minthogy ebben az esetben az atomok nullponti energiája nagy, és a nullponti rezgések lerombolják a kristály stabil, rendezett állapotát. Ha azonban a kristályt nyomás alá helyezzük, megfelelő



4.11. ábra. A gyengén kötött anharmonikus kristály ($\lambda \approx \lambda_0 \approx 2,2$) T_s^* redukált instabilitási hőmérséklete a P^* redukált nyomás függvényében ($\theta \ll \omega_D$)



4.12. ábra. A self-consistens fononok $\epsilon_{kj}/\omega_{0kj}$ frekvenciája a T^* redukált hőmérséklet függvényében a $\{k, j\}$ értékpár egy adott értéke mellett ($\lambda=3$; $\theta \ll \omega_D$)



4.13. ábra. A self-consistens fononok $\Gamma_{kj}/\epsilon_{kj}$ csillapodása a T^* redukált hőmérséklet függvényében a $\{k, j\}$ értékpár egy adott értéke mellett ($\lambda=3$; $\theta \ll \omega_D$)

A renormált fonon frekvenciákat és a fononok csillapodását (4.1.15)-nek megfelelően, a (4.3.3), (4.3.4), (4.3.8) és (4.1.30) formulák figyelembevételével

$$\frac{\epsilon_k}{\omega_{0k}} = \alpha - \frac{6}{\lambda} \{2 + 1/\gamma\}^2 \left\{ \text{Re } S_{0k} + \frac{3\pi^4}{5} \left(\frac{\tau}{\alpha} \right)^4 \text{Re } S_{1k} \right\} \quad (4.3.34)$$

$$\frac{\Gamma_k}{\omega_{0k}} = \frac{6}{\lambda} \{2 + 1/\gamma\}^2 \left\{ \text{Im } S_{0k} + \frac{3\pi^4}{5} \left(\frac{\tau}{\alpha} \right)^4 \text{Im } S_{1k} \right\} \quad (4.3.35)$$

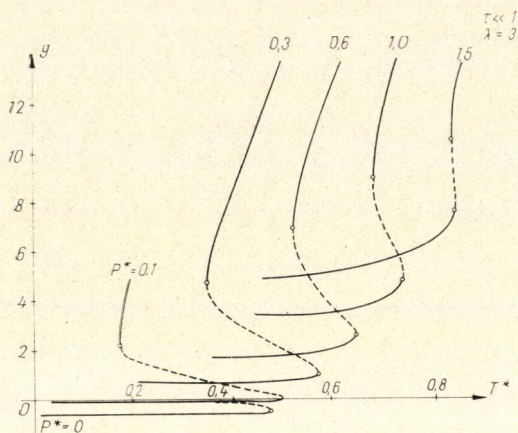
alakban írhatjuk fel. Számításainkban a $\text{Re } S_{0k} \approx \text{Im } S_{0k} \approx 1,85 \cdot 10^{-3}$ és $\text{Re } S_{1k} \approx \text{Im } S_{1k} \approx 1,25 \cdot 10^{-2}$ közelítő értéket használtuk. A 4.12. és 4.13. ábrákon az ϵ_k/ω_{0k} renormált fonon frekvenciák és a Γ_k/ϵ_k fonon csillapodások hőmérsékletfüggését mutatjuk be $\lambda=3$ esetében. Az ábrákon jól látható, hogy mind a két mennyiség gyengén függ a hőmérséklettől a $T^* \leq T_s^*$ hőmérséklettartományban. Mint láthatjuk, a fononok félértékszerűsége az instabilitási hőmérséklet környezetében kis értékű az alacsony hőmérsékletek határesetében is.

A belső energia (4.1.16) és a szabadenergia (4.1.17) kifejezéseit az alacsony hőmérsékletek határesetében

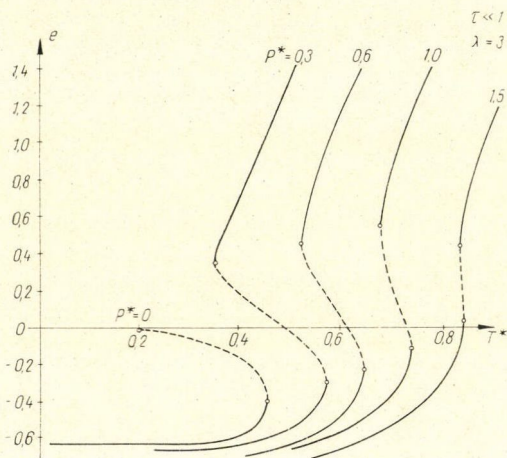
$$e = \frac{1}{N\omega_{0L}} E = \frac{\lambda}{2} \left\{ \alpha^2 (y-1) + \frac{P^*}{8} \left(\frac{l}{r_0} \right)^2 \right\} + 5\tilde{f}_3 \quad (4.3.36)$$

$$f = \frac{1}{N\omega_{0L}} F = \alpha \left\{ 1 - \frac{\pi^4}{5} \left(\frac{\tau}{\alpha} \right)^4 \right\} - \frac{\lambda}{2} \left\{ \alpha^2 (y+1) - \frac{P^*}{8} \left(\frac{l}{r_0} \right)^2 \right\} + \tilde{f}_3 \quad (4.3.37)$$

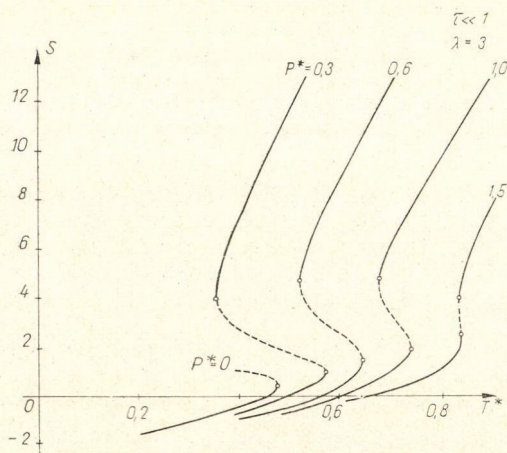
alakban írhatjuk fel, ahol a (4.1.33) és a (4.3.6) kifejezéseket vettük figyelembe,



4.14. ábra. A gyengén kötött ($\lambda=3$) anharmonikus kristály $g = (1/N\omega_{0L})F + 3P^*v^*$ termodinamikai potenciálja a T^* redukált hőmérséklet függvényében ($\theta \ll \omega_D$)



4.15. ábra. A gyengén kötött ($\lambda=3$) anharmonikus kristály $e = (1/N\omega_{0L})E$ belső energiája a T^* redukált hőmérséklet függvényében ($\theta \ll \omega_D$)



4.16. ábra. A gyengén kötött ($\lambda=3$) anharmonikus kristály $s = (1/Nk)$ S entrópiája a T^* redukált hőmérséklet függvényében ($\theta \ll \omega_D$)

továbbá azt, hogy a (4.1.18) kifejezés az alacsony hőmérsékletek határesetében

$$F_0 = N\omega_{0L} \left\{ 1 - \frac{\pi^4}{5} \left(\frac{\tau}{\alpha} \right)^4 \right\} \quad (4.3.38)$$

alakban írható. A 4.14. ábrán a redukált termodinamikai potenciál $g = f + 3P^*v^*$, a 4.15. ábrán az e belső energia és a 4.16. ábrán a redukált entrópia $s = (1/N \cdot k) S$ hőmérsékletfüggését ábrázoltuk $\lambda = 3$ esetében. Megjegyezzük, hogy a $v^*(P^*)$ függvény az alacsony hőmérsékletek határesetében is épp olyan van der Waals-jelleget mutat, mint amilyen a magas hőmérsékletek esetében a 4.7. ábrán látható, ezért ezt az ábrát itt nem mellékeljük.

α) Kis nyomás $P^* \ll 1$ esete.

Vizsgáljuk most meg azt az esetet, mikor a kristályra kis nyomás hat: $P^* \ll 1$. Behelyettesítve ekkor a (4.3.9) kifejezéseket a (4.1.34) egyenletbe, a kristály self-consistens egyenletét

$$\lambda y \left(1 - \frac{9z}{2\lambda} v_0 e^{y/2} \right) = e^{y/2} \left\{ 1 - \frac{p}{2} e^y + \eta e^{2y} \left[1 + \frac{9z}{2\lambda} (v_1 - v_0) e^{y/2} \right] \right\} \quad (4.3.39)$$

alakban nyerjük, ahol $\lambda = z\epsilon/\epsilon_0^{(0)}$; $\eta = (3\pi^4/5)(\theta^4/\omega_{0D}^3 \epsilon_0^{(0)}) \ll 1$ és $p = \frac{P^*}{8} \left(\frac{l_0}{r_0} \right)^2$. A (4.3.39)

self-consistens egyenletnek valós megoldása akkor létezik, ha $\theta \equiv \theta_s$, ahol a θ_s instabilitási hőmérsékletet a

$$\frac{\theta_s}{\omega_{0D}} \approx 0,11 (\lambda - \lambda_s)^{1/4} \approx 0,1 (P^* - P_0^*)^{1/4} \quad (4.3.40)$$

formula adja meg. A kristálynak nincs stabil állapota még a $\theta = 0$ hőmérsékleten sem, ha az atomok dimenzió nélküli kötési paramétere $\lambda < \lambda_s \approx 2,2(1 - 0,26 P^*)$, vagy ha a kristályra ható nyomás $P^* < P_0^* \approx 1,7(2,2 - \lambda)$. Megjegyezzük, hogy $\theta \approx \theta_s \ll \omega_D$ esetében a redukált nyomás $P^* \approx 4,5 p$. Az instabilitási hőmérséklet közelében $\tau = \theta/\theta_s \lesssim 1$ a (4.3.39) self-consistens egyenlet megoldását

$$y = 1,3 \left\{ 1 + 0,3 P^* - 1,5(\lambda - \lambda_s) - \sqrt{(\lambda - \lambda_s)(1 - \tau^4)} [1 + 1,5(\lambda - \lambda_s)] + 4,6(\lambda - \lambda_s)(1 - \tau^4) \right\} \quad (4.3.41)$$

alakban állíthatjuk elő.

A (4.1.15) renormált fonon frekvenciákat $\tau \lesssim 1$ esetében az

$$\epsilon_{\bar{k}j} = 0,52\omega_{0\bar{k}j} \left\{ 1 + 0,2P^* + (\lambda - \lambda_s) + 0,65\sqrt{(\lambda - \lambda_s)(1 - \tau^4)} - 47S'_{0\bar{k}j} - 0,13(\lambda - \lambda_s)\tau^4 S'_{1\bar{k}j} \right\} \quad (4.3.42)$$

kifejezés adja meg. A renormált fonon frekvencia komplex mennyiséggé válik, ha $\lambda < \lambda_s$, illetve ha $\theta > \theta_s$, ami a rács rezgési instabilitását jelenti. Az instabilitási hőmérséklet közelében a fononok csillapodását

$$\Gamma_{\bar{k}j}(\omega_{\bar{k}j}) = \omega_{0\bar{k}j} \epsilon_0^{(0)} \frac{g^2}{f^3} \{ S''_{0\bar{k}j} + \eta e^{2y} S''_{1\bar{k}j} \} \approx 25\omega_{0\bar{k}j} \{ S''_{0\bar{k}j} + \eta S''_{1\bar{k}j} \} \quad (4.3.43)$$

alakban írhatjuk fel, megjegyezzük, hogy ebből a kifejezésből, akárcsak a magas hőmérsékletek határesetében, a $\Gamma_{\bar{k}j}/\epsilon_{\bar{k}j} \approx 10^{-1}$ nagyságrend adódik.

A kristály atomjainak (4.3.11) egyensúlyi távolsága és ezzel együtt természetesen a kristály térfogata, valamint a (4.1.16) belső energiája, amelyet esetünkben az

$$\frac{1}{N} E = -\frac{z\epsilon}{2} + \epsilon_0^{(0)} \{0,97 - 0,6 P^* + 0,05(\lambda - \lambda_s) + \\ + 1,4(\lambda - \lambda_s)(1 - \tau^4) - 0,28 \sqrt{(\lambda - \lambda_s)(1 - \tau^4)} [1 + 1,4(\lambda - \lambda_s)]\} \quad (4.3.44)$$

képlet fejez ki, véges marad, ha $\theta \rightarrow \theta_s$. De a lineáris hőtágulási együttható

$$\alpha_T = k \frac{90}{al\epsilon} \frac{3\pi^4}{5} \frac{\theta^3}{\omega_{0D}^3} \left\{ \frac{1 - 1,5(\lambda - \lambda_s)}{\sqrt{(\lambda - \lambda_s)(1 - \tau^4)}} - 9,3 \right\}, \quad (4.3.45)$$

és az állandó nyomáson mért fajhő

$$C_p \approx k \frac{12\pi^4}{5} \frac{\theta^3}{\omega_{0D}^3} \left\{ \frac{14[1 + 1,4(\lambda - \lambda_s)]}{\sqrt{(\lambda - \lambda_s)(1 - \tau^4)}} - 1,4 \cdot 10^2 \right\} \quad (4.3.46)$$

a végtelenhez tart, ha $\theta \rightarrow \theta_s$.

Ha $\epsilon_0^{(0)} \ll z\epsilon$, vagyis kis anharmonicitás esetében a (4.3.39) egyenlet megoldását

$$y = \frac{1}{\lambda} \left\{ 1 - \frac{P^*}{16} + \left(\frac{1}{84} \frac{h}{f^2} + v_0 \frac{g^2}{f^3} \right) + \eta \left(1 + \frac{1}{14} \frac{h}{f^2} + v_1 \frac{g^2}{f^3} \right) \right\} \quad (4.3.47)$$

alakban írhatjuk fel, ahol $P^* \approx 8p$, ha $y \ll 1$. A (4.3.47) megoldás felhasználásával a fizikai mennyiségekre az

$$\epsilon_{kj} = \omega_{0kj} \left\{ 1 + \frac{P^*}{16} - \epsilon_0^{(0)} \left[\frac{1}{84} \frac{h}{f^2} (1 + \eta) + \frac{g^2}{f^3} (\text{Re } S_{0kj} + \eta \text{Re } S_{1kj}) \right] \right\}, \quad (4.3.48)$$

$$\Gamma_{kj} = \omega_{0kj} \epsilon_0^{(0)} \frac{g^2}{f^3} (\text{Im } S_{0kj} + \eta \text{Im } S_{1kj}), \quad (4.3.49)$$

$$\frac{1}{N} E = -\frac{z\epsilon}{2} + \epsilon_0^{(0)} \left\{ 1 - \epsilon_0^{(0)} \left[\frac{1}{168} \frac{h}{f^2} + (5B - v_0) \frac{g^2}{f^2} \right] + \right. \\ \left. + \eta \left[1 + \epsilon_0^{(0)} \left(\frac{1}{28} \frac{h}{f^2} + (v_1 - 5C) \frac{g^2}{f^3} \right) \right] \right\}, \quad (4.3.50)$$

$$C_p = k \frac{12\pi^4}{5} \frac{\theta^3}{\omega_{0D}^3} \left\{ 1 + \epsilon_0^{(0)} \left[\frac{1}{28} \frac{h}{f^2} + (v_1 - 5C) \frac{g^2}{f^3} \right] \right\}, \quad (4.3.51)$$

$$\alpha_T = k \frac{1}{2al\epsilon} \frac{3\pi^4}{5} \frac{\theta^3}{\omega_{0D}^3} \left\{ 1 + \epsilon_0^{(0)} \left(\frac{1}{14} \frac{h}{f^2} + v_1 \frac{g^2}{f^3} \right) \right\} \quad (4.3.52)$$

formulákat vezethetjük le, amelyek leírják a kristály tulajdonságait az alacsony hőmérsékletek tartományában, távol az instabilitási hőmérséklettől.

Megjegyezzük, hogy a numerikus számítások eredményei és az analitikus alakban levezetett formuláink az alacsony hőmérsékletek esetében is igen jó egyezést mutatnak.

4.4. Az instabilitási hőmérséklet és a kritikus hőmérséklet a pszeudoharmonikus közelítésben

A teljesség kedvéért kiszámítjuk az instabilitási hőmérsékletet és a kritikus hőmérsékletet a pszeudoharmonikus közelítésben is.

A kristály (4.1.13) self-consistens egyenletét pszeudoharmonikus közelítésben

$$\overline{u^2(l)} = \frac{1}{zf(\theta, l)N} \sum_{kj} \omega_{kj} \coth(\omega_{kj}/2\theta) \quad (4.4.1)$$

alakban írhatjuk fel, ahol az ω_{kj} pszeudoharmonikus frekvenciát a (4.1.5), a $f(\theta, l)$ pszeudoharmonikus erőállandót pedig a (4.1.9) formulák határozzák meg. A (4.4.1) egyenletben térjünk át a $\{\vec{k}, j\}$ szerinti összegezésről az ω szerinti integrálásra az

$$\frac{1}{3N} \sum_{kj} (\dots) = \int_0^{\omega_L} g(\omega) d\omega (\dots) = \frac{1}{2} \int_0^2 dx G(x) (\dots) \quad (4.4.2)$$

formula felhasználásával, ahol $x=2(\omega/\omega_{0L})$ és $G(x)$ a [146] dolgozatban kiszámított eloszlási függvény. Ekkor a (4.4.1) egyenletet

$$\lambda \propto y(\alpha) = \frac{3}{8 \cdot 1,02} \int_0^2 dx G(x) x \coth\left(\frac{\alpha x}{4\tau}\right) \quad (4.4.3)$$

alakban állíthatjuk elő, ahol az $y(\alpha)$ függvényt a (4.3.5) és (4.4.7) formulák határozzák meg. Összehasonlítva a (4.4.3) self-consistens egyenletet a lineáris lánc esetében kapott (3.1.38) self-consistens egyenlettel, láthatjuk, hogy ezek az egyenletek analóg szerkezetűek, és ennek megfelelően analitikai tulajdonságaik, illetve megoldásaik tulajdonságai is hasonlóak. Ezért feleslegesnek érezzük itt megismételni a 3. fejezetben mondottakat a self-consistens egyenlet megoldásainak viselkedésével kapcsolatban, hanem mindjárt rátérünk az instabilitási hőmérséklet és a kritikus hőmérséklet kiszámítására.

Mint láttuk, az instabilitási hőmérsékletet a (4.4.3) egyenlet és annak deriváltja

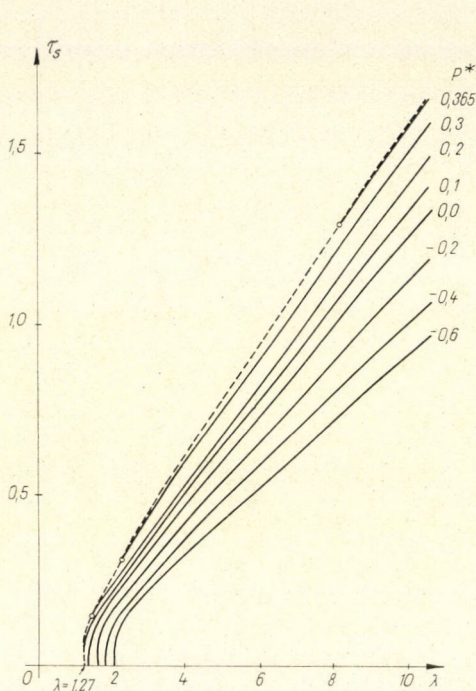
$$\lambda \{y(\alpha) + \alpha y'(\alpha)\} = -0,3676 \frac{1}{4\tau} \int_0^2 dx G(x) x^2 \operatorname{sh}^{-2}\left(\frac{\alpha x}{4\tau}\right) \quad (4.4.4)$$

szimultán megoldása adja meg. A kritikus hőmérséklet kiszámításához szimultán kell megoldani a (4.4.3), (4.4.4) egyenleteket és a (4.4.3) egyenlet kétszeri deriválásából nyert

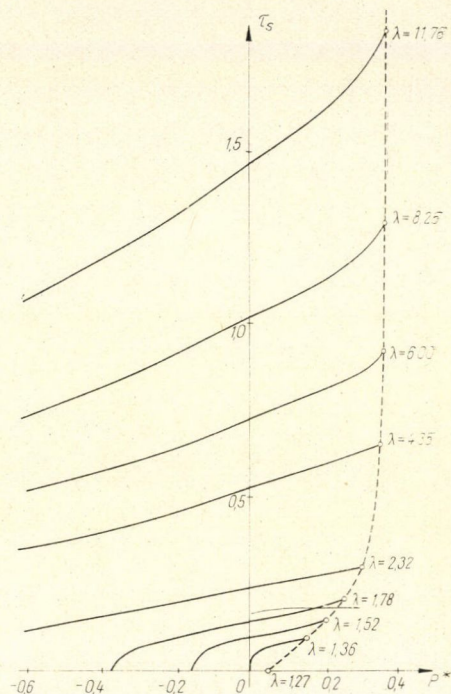
$$\lambda \{2y'(\alpha) + \alpha y''(\alpha)\} = 0,3676 \left(\frac{1}{4\tau}\right)^2 \int_0^2 dx G(x) x^3 \operatorname{ch}\left(\frac{\alpha x}{4\tau}\right) \operatorname{sh}^{-3}\left(\frac{\alpha x}{4\tau}\right) \quad (4.4.5)$$

egyenletet.

A fenti egyenletrendszereket numerikusan, gépi úton oldottuk meg, a számítások eredményeit a 4.17. és 4.18. ábrán mutatjuk be. A 4.17. ábrán a $\tau_s = \theta_s / \omega_{0L}$ instabilitási hőmérsékletet ábrázoltuk, mint a λ kötési paraméter függvényét, a 4.18. ábrán az instabilitási hőmérsékletet mint a P^* redukált nyomás függvényét adtuk meg néhány λ érték esetére. Mindkét ábrán a kritikus hőmérsékletet a szaggatott vonallal rajzolt görbe reprezentálja. Mivel az alacsony hőmérsékletek esetében ($\tau \approx 0$) a fenti formulákkal végzett gépi számítások hibája nagy, erre az esetre megfelelő sorfejtést alkalmazva külön is elvégeztük a numerikus számításokat.



4.17. ábra. Az anharmonikus kristály τ_s instabilitási hőmérséklete pszeudoharmonikus közelítésben, a λ kötési paraméter függvényében a P^* redukált nyomás különböző értékei mellett



4.18. ábra. Az anharmonikus kristály τ_s instabilitási hőmérséklete pszeudoharmonikus közelítésben, a P^* redukált nyomás függvényében a λ kötési paraméter különböző értékei mellett

Ha az atomok dimenzió nélküli kötési paramétere $\lambda \geq 12$, a redukált kritikus hőmérsékletre a $T_c^* = \theta_c / \xi = 11,76 \tau_c / \lambda \approx 1,56$ és a redukált kritikus nyomásra a $P_c^* \approx 0,37$ értékeket kaptuk. Mint az ábrákból láthatjuk, a kritikus hőmérséklet nem létezik az alacsony hőmérsékletek esetében, ha $P^* = 0$ és λ egy meghatározott értéknél kisebb. A numerikus számítások arra az eredményre vezettek, hogy $\tau = 0$ esetében a kritikus nyomás $P_c^* \approx 0,052$, és a megfelelő kötési paraméterérték $\lambda_c^s \approx 1,27$.

A [75] dolgozatban $P^* \ll 1$ esetében kiszámították az instabilitási hőmérsékletet a magas ($\tau \gg 1$), illetve az alacsony ($\tau \ll 1$) hőmérsékletek határesetekben, és az

alábbi kifejezéseket nyerték:

$$\tau_s = \frac{1,02\lambda}{3e} \left\{ 1 + \frac{e}{5,1} P^* - \frac{e}{24} \left(\frac{3}{1,02\lambda} \right)^2 \right\} \quad (\tau \gg 1; P^* \ll 1), \quad (4.4.6)$$

$$\tau_s = \frac{1,05}{\pi e} \left\{ \frac{10}{3e} (\lambda - \lambda_s) \right\}^{1/4}; \quad \lambda_s = \frac{e}{2} \left(1 - \frac{e^2}{7,12} P^* \right) \quad (\tau \ll 1; P^* \ll 1). \quad (4.4.7)$$

A numerikus számítások eredményei jó egyezést mutatnak a (4.4.6) és a (4.4.7) aszimptotikus kifejezésekkel $P^* \ll 1$ esetében.

4.5. Összefoglalás

Az anharmonikus kristályoknak dolgozatunk 2. fejezetében kifejtett self-consistens elméletét egy lapcentrált köbös ráccsal rendelkező kristály tulajdonságainak a vizsgálatára alkalmaztuk, a közvetlenül szomszédos atomok centrális párkölcsönhatását feltételezve. A feladat ilyen konkretizálásával a számításokat úgy vihettük végig, hogy azok konkrét, számszerű eredményekre vezessenek.

Először modellünkre vonatkoztatva levezettük a kristály (4.1.13) self-consistens egyenletét. Majd a self-consistens egyenletet a self-consistens potenciál (4.1.12) kifejezésének és a kristály (4.1.14) állapotegyenletének figyelembevételével megoldottuk, s kiszámítottunk néhány, a kristály tulajdonságait jellemző mennyiséget mint a kötési energia, a hőmérséklet és a nyomás függvényét. Külön-külön vizsgáltuk a kristály tulajdonságait állandó nyomás, illetve állandó térfogat esetén.

Tekintsük át eredményeinket először arra az esetre vonatkoztatva, amikor a kristályra állandó külső nyomás hat.

Megmutattuk, hogy a kristályrács, mint az atomoknak a kölcsönhatási potenciál vonzó része által létrehozott kötött állapota, kis nyomások ($P < P_c$) esetében a $T_s(P)$ instabilitási hőmérsékleten instabillá válik a kollektív gerjesztések — a self-consistens fononok — terjedése vonatkozásában. A $T_s(P)$ instabilitási hőmérsékletet kiszámítottuk mint a kötési paraméter és a nyomás függvényét az alacsony és a magas hőmérsékletek határeseiteiben: a 4.2. és a 4.11. ábra, illetve a (4.3.20) és a (4.3.40) képletek adják meg ezt a mennyiséget. Kiszámítottuk az instabilitási hőmérsékletet a pszeudoharmonikus közelítésben is: a 4.17. és a 4.18. ábrák, illetve a [75] dolgozat alapján a (4.4.6) és (4.4.7) formulák adják meg az instabilitási hőmérsékletet a pszeudoharmonikus közelítésben. Összehasonlítva az effektív köbös anharmonikus és a pszeudoharmonikus közelítésben nyert eredményeket

$$\frac{\theta_s^{ps}}{\theta_s} \approx 2,5 \quad (\theta_s \gg \omega_D) \quad (4.5.1)$$

$$\frac{\lambda_s^{ps}}{\lambda_s} \approx 0,6 \quad (\theta_s \ll \omega_D), \quad (4.5.2)$$

azt láthatjuk, hogy azok eléggé különböznek egymástól. Láthatjuk, hogyha figyelembe vesszük a potenciális energia sorfejtésének a fononok csillapodására vezető páratlan hatványkitevőjű tagjait, ez csökkenti az instabilitási hőmérsékletet, viszont

megnöveli a kötési paraméter kritikus értékét. Ezt az eredményt a fizikai szemlélet alapján könnyen megérthetjük, ha figyelembe vesszük, hogy a perturbációs számítás második közelítése a rendszer energiájának csökkentésére, következésképpen a rács stabilitásának a csökkenésére vezet.

Itt kívánjuk megjegyezni, hogy számításainkból következik az a szemléletesen kézenfekvő eredmény is, hogy a gyengén kötött atomokból felépített kristályrácsonak már a $T=0^\circ\text{K}$ hőmérsékleten sincs stabilis állapota, mert annak a kialakulását az ez esetben nagymértékű nullponti rezgések megakadályozzák.

Mint láttuk, az instabilitási hőmérséklet környezetében a self-consistens fononok frekvenciája

$$\epsilon_{kj} \approx C_1(\vec{k}j) + C_2(\vec{k}j)\sqrt{1-T/T_s(P)} \quad (4.5.3)$$

alakban írható fel, tehát $T > T_s(P)$ esetében a fononok frekvenciája komplex mennyiséggé válik, ami a kristály adott állapotának instabilitását jelenti. Megjegyezzük, hogy a self-consistens fononok csillapodása, mint azt a 4.4. és 4.13. ábrákon láthatjuk, az instabilitási hőmérséklet környezetében $T \lesssim T_s(P)$ kis értékű: $\Gamma_{kj}/\epsilon_{kj} \approx 0,1$. Az atomok relatív elmozdulásának a négyzetes középértékéből vont négyzetgyök eredményeink szerint az instabilitási hőmérsékleten is lényegesen kisebb, mint az atomok egymáshoz távolsága:

$$\sqrt{u^2(l)}/l \approx 0,10 \quad (\theta \gg \omega_D), \quad (4.5.4)$$

$$\sqrt{u^2(l)}/l \approx 0,14 \quad (\theta \ll \omega_D). \quad (4.5.5)$$

Ezért mondhatjuk, hogy ebben az esetben a rendszer kollektív gerjesztéseire vezető hosszú hatótávolságú korrelációknak lényeges szerepük van, és a kristálynak a $T_s(P)$ hőmérsékleten fellépő instabilitása a fenti kollektív gerjesztési kép érvényességének a megszűnését jelenti.

Lényeges megjegyeznünk, hogy a 4.2. ábrán bemutatott $T_s^*(P^*)$ instabilitási görbe és a nemesgáz kristályoknak a szaggatott vonallal jelölt redukált olvadáspont-görbéje [147] meglehetősen közel fekszik egymáshoz. Ez arra utal, hogy kis nyomások esetében ($P < P_c$) a kristály rezgési instabilitásának lényeges szerepe van az olvadás jelenségében.

Érdeemes megjegyeznünk továbbá, hogy kis nyomások esetén az instabilitási hőmérsékletnél magasabb hőmérsékleten egy második stabilis állapot is létezik. Ez az állapot, amelyet a 4.1. és a 4.8., 4.9. ábrák felső részén láthatunk, a mi egyfázisú modellünk esetében ugyancsak egy, a lapcentrált köbös rács szimmetriájával rendelkező kristályállapot, amely állapotban azonban az atomok relatív elmozdulásának a négyzetes középértéke nagyobb, mint az első stabil állapotban.

Mint a 4.3–4.7. és a 4.12–4.16. ábrákon láttuk, a kristály tulajdonságait jellemző fizikai mennyiségek van der Waals-jellegű viselkedést mutatnak. Ez arra utal, hogy a $T_s(P)$ görbe mentén elsőrendű fázisátalakulás megy végbe. Itt utalunk arra az eredményünkre is, hogy a lineáris hőtágulási együttható α_T (4.3.25), (4.3.45) és az állandó nyomáson mért fajhő c_p (4.3.26), (4.3.46) az instabilitási hőmérséklet környezetében $\sim(1-T/T_s)^{-1/2}$ -vel arányosak, és így a végtelenhez tartanak, ha $T \rightarrow T_s$.

Nagy nyomások esetében ($P \cong P_c$) azonban a nyomás, mint külső tér stabilizálja a kristályt, a rácsrezgések már nem képesek lerombolni a kristályrácson, mint az atomok kötött állapotát. A P_c kritikus nyomás éppen azt a nyomásértéket jelöli, amelynél a rács rezgési instabilitása megszűnik.

Fentebb kifejtett képünkbe jól beleillik az anharmonikus kristály stabilitása állandó térfogaton. Az állandó térfogat feltételezése esetén a fellépő (4.2.10), illetve (4.2.17) nyomás a hőmérséklettel gyorsan nő, és az állandó térfogat fenntartásához szükséges nyomás, mint külső tér, képes stabilizálni a kristályt. Meg kívánjuk azonban jegyezni, hogy nagy nyomások esetén a kölcsönhatási potenciál hard-core részét kell megfelelő gondossággal figyelembe venni.

A kis anharmonicitások esetében megengedhető közelítések figyelembevételével elvégzett számításaink eredményei jól megegyeznek a perturbációszámítás módszereivel nyert eredményekkel [140]–[145].

5. Összefoglalás

A tudományos-technikai fejlődés jelenlegi szakaszára az automatizálás és a számítógépek mind tömegesebb alkalmazása, az előírt paraméterekkel jellemzett, különleges tulajdonságú anyagok felhasználása a jellemző. A fejlődés új iparágak létrehozását, új anyagok és új technológiai eljárások kidolgozását és bevezetését követeli meg. Az előrehaladás tehát az anyagok tulajdonságainak, a külső hatásokra bennük lejátszódó folyamatoknak az alapos ismeretét és elmélyült megértését igényli, ez indokolja a szilárdtest-fizika és általában a kondenzált rendszerek fizikájának az utóbbi évtizedben világszerte megfigyelhető dinamikus fejlődését.

A szilárdtest-fizika egyik fontos kutatási iránya a kristályos szerkezettel rendelkező anyag tulajdonságainak vizsgálata. A kristályrács atomjainak rezgései és a kristály dinamikai, termodinamikai és rugalmas tulajdonságai között szoros kapcsolat áll fenn, a rácsrezgések tanulmányozásának egyik fontos célkitűzése éppen az, hogy megadja a kristály makroszkopikus tulajdonságainak a mikroszkopikus magyarázatát. A kísérleti technikának az utóbbi évtizedben lezajlott rohamos fejlődése azt is lehetővé tette, hogy képletesen szólva leszálljunk a rezgő atomok világába, és részleteiben is tanulmányozzuk mozgásukat. Nem tekinthető véletlennek tehát, hogy a rácsrezgések tanulmányozásának igen kiterjedt irodalma van, és minden korszak a tudomány és a számítási technika fejlettségének az adott fokán igyekezett megoldani ezt a feladatot.

A kristályok dinamikai elmélete, amelynek *Debye* [1], *Born* és *Kármán* [2] rakták le az alapjait, már az atomok rezgéseinek anharmonicitását figyelembe nem vevő harmonikus közelítésben, illetve azt csak a perturbációszámítás szokásos módszereivel figyelembe vevő közelítésben, nagy vonalakban általában helyesen tükrözi a kristály tulajdonságait.

Az elmélet a fenti megfogalmazásban azonban nyilvánvaló ellentmondásra vezet a kísérleti tapasztalattal a kvantumkristályok esetében [44], amelyknél az atomok nullponti rezgéseinek az amplitúdói nagyok, és így rezgéseik anharmonikus volta minden hőmérsékleten lényeges.

A neon, az argon, a kripton és a xenon nemesgáz kristályok vonatkozásában pedig bebizonyosodott [45], [46], hogy a perturbációs közelítés, amely a $T < 0,3T_m$ (T_m az olvadási hőmérséklet) hőmérsékleti tartományban a kristályok tulajdonságait jellemző dinamikai és termodinamikai mennyiségeket illetően a megfelelő kísérleti adatokkal jól megegyező eredményekre vezet, a $T > (0,3-0,5)T_m$ hőmérsékleti tartományban már nem biztosítja a kristályok tulajdonságainak kielégítő leírását az atomok rezgéseinek erősen anharmonikus jellege miatt.

A fentiek alapján ki kell dolgozni a kristályok dinamikai elméletének egy olyan általánosítását, amely

a) lehetővé teszi a kvantumkristályok tárgyalását,

b) a kristály dinamikai, termodinamikai és rugalmas tulajdonságainak megfelelő leírását adja a kristály létezésének teljes hőmérsékleti tartományában. E cél elérése érdekében a kristályrácsot alkotó atomok anharmonikus kölcsönhatását minden rendben következetesen figyelembe kell venni, self-consistens tárgyalásmódot kell alkalmazni. A self-consistens tárgyalásmód bevezetésének a szükséges-
ségére Born [4] hívta fel a figyelmet.

E feladat megoldása vonatkozásában elért eredményeinket az alábbiakban foglaljuk össze:

1. Kidolgoztuk az anharmonikus kristályoknak a termodinamikai Green-függvények felhasználásán alapuló self-consistens elméletét.

Megmutattuk, hogy megfelelően megválasztott termodinamikai Green-függvények segítségével ki tudjuk fejezni a kristály fizikai tulajdonságait jellemző mennyiségeket.

A kidolgozott self-consistens elmélet az anharmonikus kölcsönhatás járulékait minden rendben számításba veszi.

Az elmélet kiindulási közelítése, a pszeudoharmonikus közelítés a self-consistens fononok csillapodás nélküli terjedését írja le. Az elmélet további közelítéseiben a self-consistens fononok csillapodására és frekvenciájuk reformálására vezető háromfonos, négyfonos és így tovább rugalmatlan szórési folyamatok vehetők figyelembe. Részletesen vizsgáltuk a kidolgozott self-consistens elméletnek a fononok csillapodására a legalacsonyabb rendben vezető háromfonos rugalmatlan szórési folyamatokat figyelembe vevő effektív köbös közelítést.

Megjegyezzük, hogy gyakorlatilag egyidejűleg, egymástól és tőlünk függetlenül kidolgozták az anharmonikus kristályok self-consistens elméletének két másik változatát is. Az egyik változat a variációs elvet [56], a másik változat a diagram-technikát [69] felhasználva építi fel az anharmonikus kristályok self-consistens elméletét. Werthamer [56], [65] és Plakida [90], [91] kimutatták, hogy az elmélet e három változata ekvivalens.

2. Elméletünket először egy modellfeladat, az anharmonikus lineáris lánc tulajdonságainak a vizsgálatára alkalmaztuk. E feladat tárgyalása során mutattunk rá először [85], hogy az elmélet a lineáris lánc instabilitására vezet, ha a lineáris lánc atomjainak nullponti energiája megfelelően nagy, illetve, ha a hőmérséklet megfelelően magas.

3. A közvetlenül szomszédos atomok centrális párkölsönhatását feltételezve részletesen vizsgáltuk a lapcentrált köbös ráccsal rendelkező kristály tulajdonságait és bemutattuk, hogy elméletünk milyen új fizikai eredményekre vezet.

4. Megmutattuk, hogy a kristályrács, mint az atomoknak a kölcsönhatási potenciál vonzó része által létrehozott kötött állapota, kis nyomások ($P < P_c$) esetében a $T_s(P)$ instabilitási hőmérsékleten instabillá válik a kollektív gerjesztések — a self-consistens fononok — terjedése vonatkozásában. Mint láttuk, a self-consistens fononok ϵ_{kj} frekvenciája a $T_s(P)$ instabilitási hőmérséklet környezetében az $\epsilon_{kj} = C_1(\vec{k}, j) + C_2(\vec{k}, j) \sqrt{1 - T/T_s(P)}$ alakban írható fel, tehát $T > T_s(P)$ esetében a fononok frekvenciája komplex mennyiséggé válik, ami a kristály adott állapotának az instabilitását jelenti [5]. Megjegyezzük, hogy a self-consistens fononok csillapo-

dása, mint azt a 4.4. és 4.13. ábrákon láthatjuk, az instabilitási hőmérséklet környezetében $T \lesssim T_s(P)$ kis értékű. Az atomok relatív elmozdulásának a négyzetes középértékéből vont négyzetgyök eredményeink szerint az instabilitási hőmérsékleten is lényegesen kisebb, mint az atomok egyensúlyi távolsága: $\sqrt{u^2(l)}/l \approx 0,1$. Mindez arra mutat, hogy ebben az esetben a rendszer kollektív gerjesztéseire vezető hosszú hatótávolságú korrelációknak lényeges szerepük van, és a kristálynak a $T_s(P)$ hőmérsékleten fellépő instabilitása a fenti kollektív gerjesztési kép érvényességének a megszűnését jelenti.

A 4.2. ábrán bemutatott $T_s^*(P)$ instabilitási görbe és a nemesgáz kristályoknak a szaggatott vonallal jelölt redukált olvadáspont-görbéje $T_m^* = 0,5(1 + 0,2P^*)$ [147], meglehetősen közel fekszik egymáshoz. Ez a tény arra utal, hogy kis nyomások ($P < P_c$) esetében a kristály rezgési instabilitásának lényeges szerepe van az olvadás jelenségében.

Nagy nyomások ($P \geq P_c$) esetében azonban a nyomás, mint külső tér, stabilizálja a kristályt: a rácsrezgések már nem képesek lerombolni a kristályrácsot, mint az atomok kötött állapotát. A P_c kritikus nyomás éppen azt a nyomásértéket jelöli, amelynél a rács rezgési instabilitása megszűnik. A kristálynak a nagy nyomások ($P \geq P_c$) esetében elméletünkben következő stabilitása véleményünk szerint arra utal, hogy ekkor a hard-core korrelációkkal kapcsolatos rend-rendeztetlenség (order-disorder) átmeneteknek van lényeges szerepük az olvadás jelenségében. E probléma mélyebb tanulmányozásához azonban a hard-core korrelációkat és a vakanciák megjelenését kell kellő gondossággal figyelembe venni.

5. Megmutattuk, hogy kis tömegű, gyengén kötött atomokból felépített kristály esetében az atomok kötött állapotát már a kvantummechanikai nullponti rezgések is lerombolhatják, vagyis kellően kis értékű kötési energia esetében a kristálynak már a $T = 0^\circ\text{K}$ hőmérsékleten sincs stabil állapota. A nyomás azonban ebben az esetben is stabilizálhatja a kristályt. Az instabilitási hőmérsékletet, mint a nyomás függvényét a gyengén kötött atomokból felépített kristályok esetében a 4.11. ábrán mutattuk be.

6. A közvetlenül szomszédos atomok centrális párkölcönhatását feltételezve kiszámítottuk a lapcentrált köbös ráccsal rendelkező kristály dinamikai és termodinamikai tulajdonságait jellemző mennyiségeket a kristály létezésének teljes hőmérsékleti tartományában. Megmutattuk, hogy az instabilitási hőmérsékletnél magasabb hőmérsékleten egy második stabil állapot létezik. A kristály tulajdonságait jellemző fizikai mennyiségek van der Waals-jellegű viselkedést mutatnak, mint azt a 4.3–4.7. és a 4.12–4.16. ábrákon láthattuk. Ez arra utal, hogy a $T_s(P)$ instabilitási görbe mentén elsőrendű fázisátalakulás megy végbe. Itt jegyezzük meg, hogy a lineáris hőtágulási együttható α_T és az állandó nyomáson mért fajhő c_p az instabilitási hőmérséklet környezetében $\sim (1 - T/T_s)^{-1/2}$ -vel arányosak, és a végtelenhez tartanak, ha $T \rightarrow T_s$.

Mondhatjuk tehát, hogy a kristályok általunk kidolgozott self-consistens elmélete a kristály elsőrendű fázisátalakulásának a felléptére vezet. A fázisátalakulás folyamatának realisabb képét akkor kaphatjuk meg, ha következetesen figyelembe vesszük a más állapotba, például a folyadék-halmazállapotba való átmenet lehetőségét.

7. Megmutattuk továbbá, hogy az instabilitási hőmérsékletnél lényegesen alacsonyabb hőmérsékletek esetében a kristály fizikai tulajdonságait jellemző mennyi-

ségek vonatkozásában az általunk kidolgozott self-consistens elméletnek, illetve a perturbációs számítás szokásos módszereinek az alkalmazása azonos eredményekre vezet.

Hivatkozni szeretnénk itt [105] és [107] alapján arra, hogy a self-consistens elmélet alapján, amely a fononok csillapodására vezető rugalmatlan szórási folyamatokat a legalacsonyabb rendben veszi figyelembe, a nemesgáz kristályok tulajdonságait jellemző dinamikai, termodinamikai és rugalmas mennyiségeket kiszámítva a kapott eredmények jó egyezést mutatnak a kísérleti adatokkal, illetve a Monte Carlo kísérlet eredményeivel a kristályok létezésének teljes hőmérsékleti tartományában.

Végezetül megemlítjük, hogy az anharmonikus kristályoknak a termodinamikai Green-függvények felhasználásán alapuló self-consistens elméletét eredményesen használták fel a ferromágneses kristályok [119]–[124], a fémek [125], a folyadékok [126]–[129] elméletében, valamint a könnyű szennyező atomoknak a kristály tulajdonságaira gyakorolt hatása elméleti vizsgálatában [74], [130] is.

KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS

Először *S. V. Tyablikov* professzorról emlékezem meg. Ő kezdeményezte az anharmonikus kristályok tulajdonságainak az elméleti vizsgálatát Dubnában, és ezeket a kutatásokat élete utolsó percéig figyelemmel kísérte, tanácsaival, megjegyzéseivel támogatta.

Köszönettel tartozom kollégámnak és barátomnak *N. M. Plakidának*, akivel e vizsgálatokat együtt kezdtük el. Együttműködésünk és alkotó vitáink nagymértékben elősegítették munkánk eredményességét.

Köszönetemet fejezem ki *V. L. Aksienovnak*, *Eszenszki Józsefnek* és *V. B. Priezzhevnek* a gépi számítások elvégzésében nyújtott segítségükért.

Köszönettel tartozom a MTA Központi Fizikai Kutató Intézet igazgatóságának és a dubnai Egyesített Atomkutató Intézet Elméleti Fizikai Laboratóriuma igazgatóságának, hogy lehetővé tették e téma kidolgozását az EAI Elméleti Fizikai Laboratóriumában.

Végül, de nem utolsósorban, hálámat és köszönetemet fejezem ki *Feleségemnek* azért a türelméért és áldozatvállalásáért, amivel e dolgozat elkészülését elősegítette.

FÜGGELÉK

Magasabb rendű járulékok az anharmonikus kristály self-consistens elméletében

Plakida [90] a kauzális Green-függvények Dyson-egyenletének diagram-analízise alapján megvizsgálta az anharmonikus kristályok self-consistens elméletében alkalmazott szétkapcsolási eljárás pontosságát. Eredményei jól megvilágítják az alkalmazott közelítések lényegét, fizikai jelentését, ezért célszerűnek tartjuk azokat itt röviden összefoglalni. A továbbiakban *Plakida* [90] dolgozatát követjük.

Írjuk fel még egyszer a (2.5.1) Green-függvényeknek a 2. fejezetben már felírt (2.5.4) mozgásegyenletét

$$i^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} G_{kk'}(t-t') = 2\omega_k \delta_{kk'} \delta(t-t') + \\ + 2\omega_k \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{1...n} \mathbf{V}_n(-k, 1, \dots, n) \langle\langle A_1(t) \dots A_n(t); A_k^+(t') \rangle\rangle \quad (\text{F. 1})$$

Az (F.1) mozgásegyenlet felírásakor bevezettük az $1 \equiv \{\vec{k}_1, j_1\}$, $2 \equiv \{\vec{k}_2, j_2\}$, s így tovább, jelölést.

A diagramtechnika segítségével elvégzett számításokban gyakran alkalmazzák az irreducibilis Green-függvényeket. Mint látni fogjuk, a Green-függvényeket az (F.1) egyenlet megoldásának előállítására felhasználva lehetőség nyílik arra, hogy a self-consistens fonon térdiagramjainak végtelen sorozatát felösszegezzük, és a V_n vertex-függvények renormálását a self-consistens fonontérben pontosan meghatározzuk.

Irreducibilis Green-függvényeknek azokat a Green-függvényeket nevezzük, amelyeket szétkapcsolással alacsonyabb rendű Green-függvényekre visszavezetni már nem lehet. A diagramtechnika nyelvén ezt az állítást úgy fogalmazhatjuk meg, hogy az irreducibilis Green-függvények már nem tartalmaznak sajátenergia-járulékot a self-consistens tér közelítésben. A fenti definíció alapján, figyelembe véve a Green-függvények szimmetria-tulajdonságait az egymással kommutáló $A_1 \dots A_n$ operátorok felcserélésével kapcsolatban, az irreducibilis Green-függvényeket

$$\begin{aligned} \langle\langle A_1(t) \dots A_n(t); A_k^+(t') \rangle\rangle^{irr} &\equiv \langle\langle A_1 \dots A_n | \rangle\rangle^{irr} = \\ &= \langle\langle A_1 \dots A_n | \rangle\rangle - \sum_{m=1}^{n-2} C_n^{n-m} \langle A_{m+1} \dots A_n \rangle \langle\langle A_1 \dots A_m | \rangle\rangle^{irr} \end{aligned} \quad (F.2)$$

alakban írhatjuk fel, ahol $C_n^{n-m} = C_n^m = n! / m! (n-m)!$. Az (F.2) definiáló egyenlet alapján felírhatjuk az

$$\begin{aligned} \langle\langle A_1 \dots A_n | \rangle\rangle &= \sum_{m=1}^n C_n^m \langle A_{m+1} \dots A_n \rangle \langle\langle A_1 \dots A_m | \rangle\rangle^{irr} = \\ &= C_n^1 \langle A_2 \dots A_n \rangle \langle\langle A_1 | \rangle\rangle + C_n^2 \langle A_3 \dots A_n \rangle \langle\langle A_1 A_2 | \rangle\rangle + \\ &+ C_n^3 \langle A_4 \dots A_n \rangle \{ \langle\langle A_1 A_2 A_3 | \rangle\rangle - C_3^1 \langle A_2 A_3 \rangle \langle\langle A_1 | \rangle\rangle \} + \dots \\ &\dots + \left\{ \langle\langle A_1 \dots A_n | \rangle\rangle - \sum_{m=1}^{n-2} C_n^m \langle A_{m+1} \dots A_n \rangle \langle\langle A_1 \dots A_m | \rangle\rangle^{irr} \right\} \end{aligned} \quad (F.3)$$

azonosságot. Az (F.3) azonosság a $\langle\langle A_1 \dots A_2 | \rangle\rangle$ Green-függvény formálisan pontos előállítása az irreducibilis Green-függvények összegének alakjában. Megjegyezzük, hogy az (F.3) egyenlőség felírásakor figyelembe vettük, hogy az atomok egyensúlyi helyzetének definíciójából következően $\langle A_i \rangle = 0$. Az (F.3) előállítást nem tekinthetjük zártnak, szétkapcsolást kell alkalmazni az (F.3) azonosságban felírt korrelációs függvények vonatkozásában is, hogy az (F.3) előállítás valóban zárttá váljon. Kiindulva a korrelációs függvények spektráelőállításából, az (F.3) azonosság felhasználásával a korrelációs függvények formálisan pontos előállítását

$$\begin{aligned} \langle A_1 \dots A_n \rangle &= \sum_{m=1}^{n-1} C_{n-1}^m \langle A_{m+2} \dots A_n \rangle \{ \langle A_1 \dots A_{m+1} \rangle^{irr} \} = \\ &= C_{n-1}^1 \langle A_3 \dots A_n \rangle \langle A_1 A_2 \rangle + C_{n-1}^2 \langle A_4 \dots A_n \rangle \langle A_1 A_2 A_3 \rangle + \\ &+ C_{n-1}^3 \langle A_5 \dots A_n \rangle \{ \langle A_1 A_2 A_3 A_4 \rangle - C_3^1 \langle A_3 A_4 \rangle \langle A_1 A_2 \rangle \} + \dots \\ &\dots + \left\{ \langle A_1 \dots A_n \rangle - \sum_{m=1}^{n-3} C_{n-1}^m \langle A_{m+2} \dots A_n \rangle \{ \langle A_1 \dots A_{m+1} \rangle^{irr} \} \right\} \end{aligned} \quad (F.4)$$

alakban írhatjuk fel, ahol bevezettük a $A_k^+ = A_{n+1}$ jelölést és ezután ennek megfelelően átszámoltuk az indexeket az (F.3) kifejezéshez viszonyítva.

Az (F. 3) előállítás felhasználása lehetővé teszi, hogy az (F. 1) egyenletben az egyes tagok járulékat részben felösszegezzük. Tekintsük ugyanis az (F. 3) előállítás tetszős szerinti m -edik tagjának a járulékát az (F. 1) egyenletben

$$\begin{aligned} & \sum_{n=m}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{\substack{1, \dots, m \\ m+1, \dots, n}} V_{n+1}(-k, 1, \dots, n) C_n^m \langle A_{m+1} \dots A_n \rangle \langle \langle A_1 \dots A_m \rangle \rangle^{irr} = \\ &= \frac{1}{m!} \sum_{1, \dots, m} \langle \langle A_1 \dots A_m \rangle \rangle^{irr} \sum_{n'=0}^{\infty} \frac{1}{n'!} \sum_{1', \dots, n'} V_{m+1+n'}(-k, 1, \dots, m; 1', \dots, n') \times \\ & \quad \times \langle A_{1'} \dots A_{n'} \rangle = \\ &= \frac{1}{m!} \sum_{1, \dots, m} \tilde{V}_{m+1}(-k, 1, \dots, m) \langle \langle A_1 \dots A_m \rangle \rangle^{irr}, \end{aligned} \quad (\text{F. 5})$$

ahol bevezettük a $\tilde{V}_n(1, \dots, n)$ renormált vertex-függvényt, amelyet (2.1.14) figyelembevételével

$$\begin{aligned} \tilde{V}_n(1, \dots, n) &= \sum_{n'=0}^{\infty} \frac{1}{n'!} \sum_{1', \dots, n'} V_{n+n'}(1, \dots, n; 1', \dots, n') \langle A_{1'} \dots A_{n'} \rangle = \\ &= \sum_{l_1, \dots, l_n} e^{i\vec{k}_1 l_1 + \dots + i\vec{k}_n l_n} \frac{(\vec{e}_{k_1} \tilde{V}_{l_1})}{(2MN\omega_{k_1})^{1/2}} \dots \frac{(\vec{e}_{k_n} \tilde{V}_{l_n})}{(2MN\omega_{k_n})^{1/2}} \langle U(\vec{R}_1, \dots, \vec{R}_N) \rangle \end{aligned} \quad (\text{F. 6})$$

alakban írhatunk fel. Az n szerinti összegezést minden tagban elvégezve, figyelembe véve, hogy $m \leq n < \infty$ az (F. 1) egyenletet

$$\begin{aligned} \omega^2 G_{kk'}(\omega) &= 2\omega_k \delta_{kk'} + 2\omega_k \sum_{k_1} \tilde{V}_2(-k, k_1) G_{k_1 k'}(\omega) + \\ &+ 2\omega_k \sum_{n=2}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{1, \dots, n} \tilde{V}_{n+1}(-k, 1, \dots, n) G_{1, \dots, n, k'}^{irr}(\omega) \end{aligned} \quad (\text{F. 7})$$

alakban írhatjuk fel, ahol külön kiemeltük a \tilde{V}_2 -t tartalmazó tagot, amelyik meghatározza a fononok energiáját a self-consistens fonon tér közelítésben, vagy más szavakkal a pszeudoharmonikus közelítésben. A fononok ω_k frekvenciáját és \vec{e}_k polarizációs vektorát a (2.5.11) egyenlettel meghatározva, a \tilde{V}_2 függvényt diagonális alakra hozhatjuk

$$2\omega_k \tilde{V}_2(-k, k_1) = \omega_k^2 \delta_{kk_1}. \quad (\text{F. 8})$$

Ekkor az (F. 7) egyenletet

$$G_{kk'}(\omega) = G_k^0(\omega) \delta_{kk'} + G_k^0(\omega) \sum_{n=2}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{1, \dots, n} \tilde{V}_{n+1}(-k, 1, \dots, n) G_{1, \dots, n, k'}^{irr}(\omega) \quad (\text{F. 9})$$

alakban írhatjuk fel, ahol a

$$G_k^0 = \frac{2\omega_k}{\omega^2 - \omega_k^2} \quad (\text{F. 10})$$

Green-függvény leírja a self-consistens fononok csillapodás nélküli terjedését, míg a $G_{1, \dots, n, k'}^{irr}(\omega)$ $n \geq 2$ irreducibilis Green-függvények a különböző rugalmatlan szórási folyamatokat írják le, amelyek a self-consistens fononok csillapodására és frekvenciájuk renormálására vezetnek.

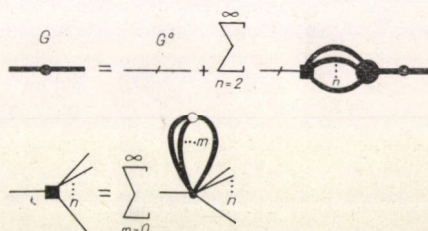
Az egy-fonon kauzális Green-függvény formálisan pontos egyenletét a diagram-technika szabályainak felhasználásával sematikusan az F. 1. ábrán ábrázoltuk [90]. A vastag vonal a kis fekete körrel a pontos egy-fonon Green-függvényt, míg a vékony vonalak a nulladik közelítés, $G_k^0(\omega)$ Green-függvényét ábrázolják. A renormált \tilde{V}_n vertex-függvényt, amelyet a felső sorban egy kis fekete négyzettel szimbolizáltunk, az F. 1. ábra második sorában rajzoltuk fel az (F. 6) egyenlet alapján. A második sorban a kis fekete kör a kiindulási vertex-függvényt jelenti, míg az m -fonon korrelációs függvényt egy kis fehér körrel és a belőle kiinduló m számú vastag vonallal ábrázoltuk. Az F. 1. ábra első sorának jobb oldalán levő nagy fekete kör a $G_{1,\dots,n,k}^{\text{irr}}(\omega)$ irreducibilis Green-függvénnyel kapcsolatos bonyolult vertexet szemlélteti.

Az ily módon előállított (F. 9) egyenlet azonban nem zárt, mivel az egy-fonon Green-függvény (F. 9) egyenletében az n -fonon ($n \geq 2$) irreducibilis Green-függvény szerepel, amely definíció szerint nem vezethető vissza alacsonyabb rendű Green-függvényekre. Feltételezhető azonban, hogy a magasabb rendű irreducibilis Green-függvények, amelyek 3, 4, ..., n fonon korrelációját írják le, gyorsan csillapodnak, és ennek megfelelően az (F. 9) egyenletben a végtelen sort valamilyen n értéknél meg lehet szakítani. Ekkor az (F. 4), (F. 6) és (F. 9) egyenletekből álló egyenletrendszer zárttá válik, és az adott közelítésben megoldható. Megjegyezzük, hogy a Green-függvények (F. 3) előállítása az irreducibilis Green-függvények felhasználásával megfelel a statisztikus mechanika N test problémájában gyakran alkalmazott kumuláns előállításnak [148], amelynek alkalmazásakor általában azt tapasztalhatjuk, hogy az előállítás néhány első tagjának a számításba vétele a rendszer eléggé pontos leírását eredményezi.

Könnyen beláthatjuk, hogy dolgozatunkban a fentieknek megfelelően jártunk el. A 2. fejezet 5. pontjában a legegyszerűbb három-fonon rugalmatlan szórási folyamatok figyelembevételével fejtettük ki az anharmonikus kristályok self-consistens elméletét. Mint láttuk, az anharmonikus kristályok self-consistens elmélete az effektív köbös közelítésben a nemesgáz kristályok tulajdonságainak jó leírását adja e kristályok létezésének teljes hőmérsékleti tartományában.

Megjegyezzük, hogy az elvégzett becslések arra mutatnak, hogy az n -fonon ($n > 3$) szórási folyamatok járuléka elég kicsi, ha az atomok viszonylagos elmozdulása nem nagy (a Green-függvény hidrodinamikai határértéke $k \rightarrow 0$ és $\omega \rightarrow 0$ külön vizsgálatot igényel). Mint azt dolgozatunk 4. fejezetében megmutattuk, az atomok viszonylagos elmozdulása még az instabilitási hőmérséklet környezetében is kis értékű: $\sqrt{u^2(I)}/l \approx 0,1$, és így a fentieknek megfelelően a kristály dinamikai, termodinamikai és rugalmas tulajdonságainak elméleti vizsgálatánál elegendőnek látszik a három-fonon rugalmatlan szórási folyamatokat számításba venni, vagyis az effektív köbös közelítést alkalmazni.

A [90] dolgozat eredményeit felhasználva Plakida [91] kiszámította az anharmonikus kristály szabadenergiáját, másodrendben figyelembe véve az atomok



F.1. ábra. Az egy-fonon Green-függvény egyenletének sematikus ábrázolása [90] alapján

renormált anharmonikus kölcsönhatását. A szabadenergiára így nyert kifejezés analízise alapján *Plakida* [91] kimutatta, hogy a termodinamikai Green-függvények alkalmazása [72], [91], a hőmérsékleti Green-függvények alkalmazása [69] és a variációs elv alkalmazása [56], [65] a kristály szabadenergiájának vonatkozásában azonos kifejezésre vezet, és így e három módszer egymással ekvivalens.

IRODALOM

1. *P. Debye*, Ann. Phys. 39, 789, 1912.
2. *M. Born* and *T. von Kármán*, Phys. Zs. 13, 297, 1912.
3. *M. Born* and *R. Oppenheimer*, Ann. d. Phys. (4) 84, 457, 1927.
4. *M. Born*, in Festschrift zur Feier des zweihundertjährigen Bestehens der Akademie der Wissenschaften in Göttingen:
I. Mathematisch-physikalische Klasse, Springer-Verlag, Berlin-Göttingen-Heidelberg, 1951.
5. *M. Born* and *K. Huang*, „Dynamical Theory of Crystal Lattices”, Oxford Univ. Press (Clarendon), London and New York, 1954.
6. *A. A. Maradudin*, *E. W. Montroll* and *G. H. Weiss*, Solid State Physics Supplement 3: „Theory of Lattice Dynamics in the Harmonic Approximation”, Academic Press, New York and London, 1963.
7. *G. Leibfried*, in Handbuch der Physik, edited by *S. Flügge*, 2nd ed., Vol. 7, Part 1, p. 104, Springer-Verlag, Berlin-Göttingen-Heidelberg, 1955.
8. *G. Leibfried* and *W. Ludwig*, in Solid State Physics, edited by *F. Seitz* and *D. Turnbull*, Vol. 12, p. 275, Academic Press, New York and London, 1961.
9. *R. A. Cowley*, Adv. Phys. 12, 421, 1963; Rep. Prog. Phys. 31, 123, 1968.
10. *W. Ludwig*, in Ergebnisse der exakten Naturwissenschaften, Bd. 43, Springer-Verlag, Berlin-Göttingen-Heidelberg, 1967.
11. *Ph. C. K. Kwok*, in Solid State Physics, edited by *F. Seitz*, *D. Turnbull* and *H. Ehrenreich*, Vol. 20, p. 214, Academic Press, New York and London, 1967.
12. *N. N. Bogoljubov* and *S. V. Tyablikov*, Dokl. Akad. Nauk SSSR, 126, 53, 1959.
13. *D. N. Zubarev*, Uspekhi fiz. nauk, 71, 71, 1960.
14. *V. L. Bonch-Bruевич* and *S. V. Tyablikov*, „The Green-Function Method in Statistical Mechanics”, North-Holland Publ. Comp., Amsterdam, 1962.
15. *A. A. Abrikosov*, *L. P. Gorkov* and *J. E. Dzyaloshinski*, „Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics”, Prentice-Hall Inc., Englewood Cliffs, New Jersey, 1963.
16. *L. P. Kadanoff* and *G. Baym*: „Quantum Statistical Mechanics“ W. A. Benjamin Inc. New York 1962.
17. *S. V. Tyablikov*: „Methods in the Quantum Theory of Magnetism“ Plenum Press New York, 1967.
18. *D. N. Zubarev*: „Nonequilibrium Statistical Thermodynamics“ Nauka Moscow 1971.
19. *V. N. Kashcheev* and *M. A. Krivoglaz*, Fiz. tverd. tela, 3, 1528, 1961.
20. *A. A. Maradudin* and *A. E. Fein*, Phys. Rev. 128, 2589, 1962.
21. *A. A. Maradudin* and *P. A. Flinn*, Phys. Rev. 129, 2529, 1963.
22. *J. J. J. Kokkedee*, Physica, 28, 374, 1962.
23. *B. V. Thompson*, Phys. Rev. 131, 1420, 1963.
24. *K. N. Pathak*, Phys. Rev. 139, A1569, 1965.
25. *Yu. Kagan* and *A. P. Zhernov*, Zh. Eksp. Teor. Fiz. 48, 971, 1965.
26. *T. Högborg*, Ark. Fyz. (Sweden) 29, 519, 1965; 34, 121, 1967.
27. *R. K. Wehner*, phys. stat. sol. 22, 527, 1967.
28. *P. Gluck*, Proc. Phys. Soc. London, 92, 192, 1967.
29. *A. E. Marinchuk* and *V. A. Moskalenko*, Fiz. tverd. tela, 5, 575, 1963.
30. *L. J. Sham*, Phys. Rev. 139, A1189, 1965.
31. *K. N. Pathak* and *Y. P. Varshni*, Phys. Lett. 28A, 539, 1969.
32. *R. C. Shukla* and *E. R. Muller*, phys. stat. sol. (b) 43, 413, 1971.
33. *R. C. Shukla* and *E. R. Muller*, Am. J. Phys. 39, 77, 1971.
34. *Ph. C. K. Kwok* and *P. C. Martin*, Phys. Rev. 142, 495, 1966.
35. *W. Götze* and *K. H. Michel*, Phys. Rev. 157, 738, 1967.
36. *R. A. Cowley*, Proc. Phys. Soc. London, 90, 1127, 1967.

37. L. J. Sham, Phys. Rev. 156, 494, 1967; 163, 401, 1967.
38. C. P. Enz, Ann. Phys. (USA), 46, 114, 1968.
39. G. Niklasson and A. Sjölander, Ann. Phys. (USA), 49, 249, 1968.
40. G. Niklasson, Ann. Phys. (USA), 59, 263, 1970.
41. R. Klein and R. K. Wehner, Phys. Kondens. Mat. 8, 141, 1968; 10, 1, 1969; Physica, 52, 92, 1971.
42. P. F. Meier, Phys. Kondens. Mat. 8, 241, 1969.
43. R. A. Guyer, in Solid State Physics, edited by F. Seitz, D. Turnbull and H. Ehrenreich, Vol. 23, p. 413, Academic Press New York and London 1969.
44. F. W. de Wette and B. R. A. Nijboer, Phys. Lett. 18, 19, 1965.
45. M. L. Klein, G. K. Horton and J. L. Feldman, Bull. Am. Phys. Soc. 13, 689, 1968; Phys. Rev. 184, 968, 1969.
46. J. L. Feldman, M. L. Klein and G. K. Horton, Phys. Rev. 184, 910, 1969.
47. D. J. Hooton, Phil. Mag. (7) 46, 422, 433, 1955; (8) 3, 49, 1958.
48. S. V. Tyablikov, Zh. Eksp. Teor. Fiz. 18, 368, 1948.
49. W. Brenig, Zs. Phys. 171, 60, 1963.
50. G. Meissner, Zs. Phys. 205, 249, 1967.
51. A. A. Vlasov: „Statistical Distribution Functions“ Nauka Moscow 1966. Ch. 9; Teor. i Mat. Fiz. 5, 388, 1970.
52. I. P. Bazarov, Vest. Mosc. Univ. ser. fiz.-astr. No. 2,7; No. 4, 3, 1965; No. 5, 87, 1968.
53. D. R. Fredkin and N. R. Werthamer, Phys. Rev. 138, A1527, 1965.
54. N. S. Gillis and N. R. Werthamer, Phys. Rev. 167, 607, 1968.
55. W. C. Kerr and A. Sjölander, Phys. Rev. B1, 2723, 1970.
56. N. R. Werthamer, Am. J. Phys. 37, 763, 1969.
57. N. Boccara and G. Sarma, Physics, 1, 219, 1965.
58. L. H. Nosanov and N. R. Werthamer, Phys. Rev. Lett. 15, 618, 1965.
59. F. D. de Wette, L. H. Nosanov and N. R. Werthamer, Phys. Rev. 162, 824, 1967.
60. T. R. Koehler, Phys. Rev. Lett. 17, 89, 1966.
61. T. R. Koehler, Phys. Rev. Lett. 18, 654, 1967.
62. T. R. Koehler, Phys. Rev. 165, 942, 1968.
63. T. R. Koehler and N. R. Werthamer, Phys. Rev. A3, 2074, 1971.
64. N. S. Gillis, N. R. Werthamer and T. R. Koehler, Phys. Rev. 165, 951, 1968.
65. N. R. Werthamer, Phys. Rev. B1, 572, 1970.
66. J. Ranninger, Phys. Rev. 140, A2031, 1965.
67. H. Horner, Z. Phys. 205, 72, 1967.
68. W. Götze, Phys. Rev. 156, 951, 1967.
69. Ph. F. Choquard: „The Anharmonic Crystal“ W. A. Benjamin Inc. New York 1967.
70. V. V. Goldman, G. K. Horton and M. L. Klein, J. Low Temp. Phys. 1, 391, 1969.
71. N. M. Plakida and T. Siklós, Report JINR P4-3449, Dubna, 1967; Acta Phys. Hung. 25, 17, 1968.
72. N. M. Plakida and T. Siklós, Report, JINR P4-4032, Dubna, 1968; phys. stat. sol. 33, 103, 1969.
73. N. M. Plakida and T. Siklós, in VI-th Annual Winter School of Theor. Physics Karpacz, February 16—March 1, 1969 Lectures, Inst. of Theor. Physics University of Wrocław, Wrocław, 1969.
74. S. Takeno, Suppl. Prog. Theor. Phys. 45, 137, 1970.
75. N. M. Plakida, Fiz. tverd. tela, 11, 700, 1969.
76. N. M. Plakida and T. Siklós, Report JINR P4-4575, Dubna, 1969.
77. N. M. Plakida and T. Siklós, phys. stat. sol. 39, 171, 1970.
78. T. Siklós, Report JINR E4-5390, Dubna, 1970; Acta Phys. Hung. 30, 193, 1971.
79. T. Siklós, Acta Phys. Hung. 30, 301, 1971.
80. T. Siklós and V. L. Aksienov, Reports JINR E4-5772, E4-5773, E4-5774, Dubna, 1971; Acta Phys. Hung. 31, 335, 345, 1972.
81. T. Siklós and V. L. Aksienov, Report JINR P4-5826, Dubna, 1971; phys. stat. sol. (b) 50, 171, 1972.
82. Vo Hong Anh, Reports JINR P4-4933, E4-5508, Dubna, 1970; Acta Phys. Hung. 30, 259, 1971.
83. L. von Heimendahl, Zs. f. Physik 244, 402, 1971.
84. N. M. Plakida, Report JINR, P4-6066, Dubna, 1971.
85. N. M. Plakida and T. Siklós, Phys. Lett. 26A, 342, 1968.

86. N. M. Plakida and T. Siklós, Report, JINR P4—3706, Dubna, 1968; *Acta Phys. Hung.* 26, 387, 1969.
87. N. M. Plakida and T. Siklós, Report, JINR P4-4033, Dubna, 1968; *phys. stat. sol.* 33, 113, 1969.
88. T. Siklós, Reports JINR P4-4921, E4-5389, E4-5521. Dubna, 1970; *Acta Phys. Hung.* 30, 181, 1971.
89. T. Siklós and V. L. Aksienov, Report JINR P4-5831, Dubna, 1971; *Acta Phys. Hung.*, 32, 39, 1972.
90. N. M. Plakida, *Teor. i Mat. Fiz.* 5, 147, 1970.
91. N. M. Plakida, *Teor. i Mat. Fiz.* 12, 135, 1972.
92. G. Meissner, *Phys. Lett.* 27A, 261, 1968; *Phys. Rev. Lett.* 21, 435, 1968.
93. R. A. Guyer, *Solid St. Comm.* 7, 315, 1969.
94. H. Horner, *Phys. Rev.* A1, 1712, 1722, 1970.
95. T. R. Koehler and N. R. Werthamer, *Phys. Rev.* A3, 2039, 1791.
96. W. Götze and K. H. Michel, *Zs. Phys.* 217, 170, 1968.
97. W. Götze and K. H. Michel, *Zs. Phys.* 223, 199, 1969.
98. H. Beck and P. F. Meier, *Phys. Kondens. Mat.* 12, 16, 1970.
99. V. V. Goldman, G. K. Horton and M. L. Klein, *Phys. Rev. Lett.* 21, 1527, 1968; *Phys. Lett.* 28A, 341, 1968.
100. T. R. Koehler, *Phys. Rev. Lett.* 22, 777, 1969.
101. V. V. Goldman, G. K. Horton, T. H. Keil and M. L. Klein, *J. Phys. C. Solid St. Phys.* 3, L 33, 1970.
102. V. V. Goldman, G. K. Horton and M. L. Klein, *Phys. Rev. Lett.* 24, 1424, 1970.
103. M. L. Klein, G. G. Chell, V. V. Goldman and G. K. Horton, *J. Phys. C. Solid St. Phys.* 3, 806, 1970.
104. G. K. Horton, V. V. Goldman and M. L. Klein, *J. Appl. Phys.* 41, 5138, 1970.
105. M. L. Klein, V. V. Goldman and G. K. Horton, *J. Phys. Chem. Solids* 31, 2441, 1970.
106. G. K. Horton, V. V. Goldman and M. L. Klein, *Phys. Rev.* B2, 4995, 1970.
107. M. L. Klein and W. G. Hoover, *Phys. Rev.* B4, 537, 539, 1971.
108. H. R. Glyde, *J. Phys. C. Solid St. Phys.* 3, 810, 1970.
109. N. S. Gillis, T. R. Koehler and N. R. Werthamer, *Phys. Rev.* 175, 1110, 1968.
110. H. R. Glyde and R. A. Cowley, *Solid St. Com.* 8, 923, 1970.
111. H. R. Glyde, *Canad. J. Phys.* 49, 761, 1971.
112. H. Horner, *Phys. Rev. Lett.* 25, 147, 1970.
113. L. H. Nosanow and C. M. Varma, *Phys. Rev.* 187, 660, 1969.
114. H. R. Glyde and F. C. Khanna, *Canad. J. Phys.* 49, 3997, 1971.
115. H. R. Glyde, *J. Low. Temp. Phys.* 3, 559, 1970.
116. R. A. Guyer and L. I. Zane, *Phys. Rev.* 188, 445, 1969.
117. N. R. Werthamer, *Phys. Rev.* A2, 2050, 1970.
118. G. G. Chell, V. V. Goldman, M. L. Klein and G. K. Horton, *Phys. Rev.* B2, 560, 1970.
119. S. V. Tyablikov and H. Konwent, *Phys. Lett.* 27A, 130, 1968; Report, JINR P4-3794, Dubna, 1968.
120. H. Konwent, *Phys. Lett.* 28A, 237, 1968, Report JINR P4-4028, Dubna, 1968.
121. H. Konwent and N. M. Plakida, *Teor. i Mat. Fiz.* 3, 135, 1970.
122. N. M. Plakida, *Phys. Lett.* 32A, 134, 1970.
123. H. Konwent and N. M. Plakida, *Teor. i Mat. Fiz.* 8, 119, 1971.
124. H. Konwent and N. M. Plakida, *Phys. Lett.* 37A 173, 1971.
125. N. M. Plakida, *J. Phys. C. Solid St. Phys.* 4, 1680, 1971.
126. V. B. Priezzhev, Report, JINR P4-4502, Dubna, 1969.
127. V. B. Priezzhev, *Acta Phys. Polonica* A39, 401, 1971.
128. S. Takeno and M. Goda, *Prog. Theor. Phys.* 45, 331, 1971.
129. V. M. Sysoev, *Pismo v Zh. Eksp. Teor. Fiz.* 14, 289, 1971.
130. K. Parlinski, *Acta Phys. Polonica* A37, 19, 1970.
131. M. Born, *J. Chem. Phys.* 7, 591, 1939.
132. I. P. Bazarov, *Fiz. tverd. tela*, 11, 840, 1969.
133. D. J. Honski, *Fiz. tverd. tela*, 11, 209, 1969.
134. Y. Ida, *Phys. Rev.* 187, 951, 1969; *Phys. Rev.* B1, 2488, 1970.
135. N. N. Bogoliubov, *Phys. Abh. Su.* 6, 1, 113, 229, 1962; Report JINR, R-1451, Dubna, 1963; N. N. Bogoliubov: *Izbrannüe trudü v trech tomach*, Vol. III. p. 174 Naukova Dumka, Kiev, 1971.

136. G. Meissner, Phys. Rev. B1, 1822, 1970.
137. D. M. Mermin, Phys. Rev. 176, 250, 1968.
138. A. A. Maradudin, in Solid State Physics, edited by F. Seitz and D. Turnbull, vol. 18, p. 273, vol. 19, p. 1, Academic Press, New York and London, 1966.
139. D. Pines: „Elementary Excitations in Solids“ Benjamin Inc., New York 1963.
140. A. A. Maradudin, P. A. Flinn and R. A. Coldwell-Horsfall, Ann. Phys. (USA), 15, 337, 1961.
141. A. A. Maradudin, P. A. Flinn and R. A. Coldwell-Horsfall, Ann. Phys. (USA) 15, 360, 1961.
142. P. A. Flinn and A. A. Maradudin, Ann. Phys. (USA), 22, 223, 1963.
143. J. S. Dugdale and D. K. MacDonald, Phys. Rev. 96, 57, 1954.
144. A. A. Maradudin, A. E. Fein and G. H. Vineyard, phys. stat. sol. 2, 1479, 1962.
145. A. A. Maradudin, phys. stat. sol. 2, 1493, 1962.
146. R. B. Leighton, Rev. Mod. Phys. 20, 165, 1948. J. S. Brown and G. K. Horton, Phys. Rev. Lett. 18, 647, 1967.
147. A. Michels and C. Prins, Physica (Utrecht) 28, 101, 1962.
148. N. N. Bogoliubov: Problemü dinamicheskoy teorii v statisticheskoy fiziki: Gostechizd. Moszkva, 1946.
149. A. Zawadowski and J. Ruwals, Phys. Rev. Lett. 24, 1111, 1970.
150. J. Ruwals and A. Zawadowski in Proceedings of the Second International Conference on Light Scattering in Solids (Paris, July 19—23, 1971) edited by M. Balkanski, p. 29. Flammarion Sciences, Paris, 1971.
151. J. F. Scott, in Proceedings of the Second International Conference on Light Scattering in Solids (Paris, July 19—23, 1971) edited by M. Balkanski, p. 387 Flammarion Sciences Paris 1971.

TARTALOMJEGYZÉK

1. Bevezetés	485
2. A termodinamikai Green-függvények alkalmazása az anharmonikus kristályok self-consistens elméletében	496
2.1. A kristály Hamilton-operátora	497
2.2. A kristály dinamikai jellemzői és a termodinamikai Green-függvények	499
2.3. A kristály szabadenergiája, belső energiája és állapotegyenlete	505
2.4. A pszeudoharmonikus közelítés	511
2.5. Az anharmonikus kristály self-consistens elmélete	518
3. Az anharmonikus lineáris lánc	527
A) Az anharmonikus lineáris lánc elmélete a pszeudoharmonikus közelítésben	528
3.1. A self-consistens egyenletrendszer	528
3.2. A rögzített hosszúságú lineáris lánc	533
3.3. Az anharmonikus lineáris lánc állandó nyomás esetében	536
B) Az anharmonikus lineáris lánc elmélete az effektív köbös anharmonikus közelítésben ..	549
3.4. A self-consistens egyenletrendszer	549
3.5. A rögzített hosszúságú lineáris lánc	551
3.6. Az anharmonikus lineáris lánc állandó nyomás esetében	553
4. A háromdimenziós anharmonikus kristály	558
4.1. A self-consistens egyenletrendszer	559
4.2. Az anharmonikus kristály állandó térfogaton	566
4.3. Az anharmonikus kristály állandó nyomáson	568
4.4. Az instabilitási hőmérséklet és a kritikus hőmérséklet a pszeudoharmonikus közelítésben ..	581
4.5. Összefoglalás	583
5. Összefoglalás	585
6. Függelék. Magasabb rendű járulékok az anharmonikus kristály self-consistens elméletében ..	588
7. Irodalom	592

KÜLFÖLDI PUBLIKÁCIÓK

A MTA LUMINESZCENCIA ÉS FÉLVEZETŐ TANSZÉKI KUTATÓ CSOPORT TAGJAINAK 1971-BEN KÜLFÖLDI FOLYÓIRATOKBAN MEGJELENT DOLGOZATAINAK ADATAI

1. Gyulai József—O. Meyer—J. W. Mayer—V. Rogriguez, Evaluation of silicon nitride layers of various composition by backscattering and channeling-effect measurements. *J. Appl. Phys.* 42, No. 1, 451—456, 1971.
2. Gyulai József—J. W. Mayer—V. Rogriguez—A. Y. C. Yu—H. J. Gopen, Alloying behavior of Au and Au-Ge on GaAs. *J. Appl. Phys.* 42, No. 9, 3578—3585, 1971.
3. Gyulai József—O. Meyer—R. D. Pashley—J. W. Mayer, Lattice location and dopant behavior of group II and VI elements implanted in silicon. *Radiation Effects* 7, 17—24, 1971.
4. Hevesi Imre—A. A. Abdullaev—V. Sz. Lebedev, Szpektrü monokrisztallok V_2O_5 infrakrasznoj oblaszti. *Krisztallografija* 16, Vü. 2, 334—338, 1971.
5. Karvaly Béla—Hevesi Imre Investigations on diffuse reflectance spectra of V_2O_5 powder. *Z. Naturforsch.* 26a, Heft 2, 245—249, 1971.
6. Ketskeméty István—Kozma László—Szalma István—Rácz Béla—Huhn Edit: Iszszledovanie vozmozsnosztii nasztrojki zsidkosztnüh lazerov putem izmenenija koncentracii. *Zs. Prikladnoj Szpektroszkopii* 14, Vü. 6, 1000—1003, 1971.
7. Ketskeméty István—Kozma László—Farkas Éva, Metod szpektrofotometriczeszkogo izucsenija szlabopogloscsajuscsih szred. *Zs. Prikladnoj Szpektroszkopii* 15, Vü. 5, 909—919, 1971.
8. Kozma László—Hevesi János, Comments on the relation between temperature radiation and luminescence emission. *Acta Phys. Polon.* A40, No. 3, 277—282, 1971.
9. Singhal, G. S.—Hevesi János, The correlation between the absorption and the fluorescence energy spectra and the quantum yield of chlorophyll-a in different solvents. *Photochem. Photobiol.* 14, No. 4, 509—514, 1971.

KÖNYVISMERTETÉSEK

Hyperfine Interactions in Excited Nuclei, ed. by G. Goldring and R. Kalish, Gordon and Breach, New York, London, Paris

1971

Az atommag mágneses és kvadrupólnyomatéka kölcsönhatásba lép a környező mágneses és elektromos terekkel. Ha a kölcsönhatás az atommag és az elektronhéj között lép fel, és nem külső tér okozza, akkor ezt hiperfinom kölcsönhatásnak nevezzük. Az atommagok alapállapotainak a kölcsönhatását már több évtizede tanulmányozzák, a gerjesztett állapotok kölcsönhatásainak az intenzív vizsgálata csak néhány éve indult meg. Az első ilyen jellegű konferencia Kaliforniában, a másik Izraelben volt.

Az ismertetendő könyv az Izraelben rendezett konferencia anyagát foglalja magába. A recenszens rendelkezésére álló 3. és 4. kötet több fontos témakörrel ad összefoglaló értékelést. Ezek a következők: relaxációs effektusok a Mössbauer-spektrumokban, hiperfinom kölcsönhatások a vákuumban, gázokban, ill. nem mágneses anyagokban kilökött ionok esetén, tranziensterek. A magfizikával foglalkozó fejezetben összefoglaló cikket találunk a kvadrupólnyomatékok, mágneses nyomatók méréseinek jelenlegi állásáról, továbbá ezek elméleti értelmezéséről.

Mindezek a témakörök a ma élő tudomány erősen kutatott témaköréi, rendkívül hasznos, hogy a kiadó a könyv gyors megjelentetésével olyan területekről nyújt könyvből összegyűjtött ismeretanyagot, amely a kutatás élvonalát képezi és fontosságában állandóan növekedik.

A könyvet rendkívül hasznos táblázatok egészítik ki a magtöltés sugarának változásairól, a hiperfinom terekről és a magnyomatékok értékéről. (K. L.)

Recent Developments in the Chemistry of Natural Carbon Compounds. IV./N.A.

Preobrahenski—G. A. Parfenov: Zsiraldehidek lipidjei; N. K. Kochetkov—A. F. Bochov: Cukor ortoészterek és azok felhasználása a szintézisekben; M. M. Mollov—H. B. Dutshwska—V. St. Georgiev: Thalictrum alkaloidák. Akadémiai Kiadó Bp. 1971.

A *zsiraldehid lipidek* c. monográfia egy igen időszerű, aktuális igényt elégít ki. Összefoglalja zsiraldehidek kutatása területén elért eddigi eredményeket. Három fő típusát a neutrális plazmalogéneket és a foszfatid típusú glicero-kolin, illetve kolamin, valamint a szfingotipusokat részletesen ismerteti.

Ismerteti azok előfordulását, mennyiségét a különböző szervezetekben és szövetekben, kémiai természetüket, az izolálási és azonosítási módszereket, valamint a lehetséges biológiai szerepüket. Bár a biokémiai szintézis módja a legtöbb esetben ismert, mégis vitatott mind az anyagcserejük, mind a biológiai funkciójuk.

Azt, hogy legnagyobb mennyiségben az idegszövetben fordulnak elő, — a lipid aldehidek bizonyos fokú inaktivitásával magyarázzák.

A gliceroplazmalogének közül legnagyobb mennyiségben az etanolamin, kevésbé a kolin és legkisebb mennyiségben a szerinfoszfatidok vannak képviselve.

Filogeniai sorozatban a gerinctelen és gerinces állatok igen eltérő mennyiségben találhatók, újszülöttek izmaiból és csontvelőjéből, szemben a felnőtt állatokkal, még hiányzik és a stressz növeli azok mennyiségét. Annak ellenére, hogy a zsiraldehid lipideknek számos specifikus funkcióját ismerjük, molekuláris szintű szerepüket a biokémiai folyamatokban szinte teljesen homály fedi, azt tudjuk azonban, hogy néhány esetben bizonyos enzimek aktivitását befolyásolják.

Szintézisüket sokféle módszerrel megoldották, és ma már minden természetben ismert komponens is laboratóriumi módszerrel előállítható.

A monográfia igen értékes tanulmány szerves kémikusok, biokémikusok és klinikusok számára, de különösen azoknak, akik a lipidek szerepét kutatják, nyújt az anyagcsere folyamatokban sok hasznos.

A „*cukor orto-észterek*” című monográfia a szénhidrátokkal foglalkozó szerves kémikusoknak és a szénhidrátanyagcserével foglalkozó biokémikusoknak, klinikusoknak, gyógyszerkutatóknak és növényfiziológusoknak adhat hasznos ismereteket.

A monográfia rövid történeti áttekintés után megismerteti az ortocukorészterek osztályozásával, nomenklatúrájával és savak, lúgok, specifikus reagensekkel szembeni viselkedésükkel, majd a régebben alkalmazott és jelenleg követett szintézis módszereivel, valamint a struktúrájuk feltárására irányuló módszerekkel. A tanulmány kiterjed a glikozidok, poliszacharidok és egyéb származékaik szintézisére orto-észterekből.

A mű alapvető értéke, hogy összegezi mintegy 200 szénhidrát származék és orto-észter adatait, struktúráját, fiziko-kémiai tulajdonságait, számos esetben reakcióit, és ezeket áttekinthetően, táblázatosan foglalja össze. A monográfiát gondosan összeválogatott irodalmi jegyzék egészíti ki.

A „*Thalictrin* alkaloidák*” című monográfia különösen specifikus tanulmány. Ez a nálunk is honos és néhány fajjal képviselt növényfajta évelő és mintegy 30 alkaloidát termelő fajt tartalmaz. Különösen nagy fajszámban túllünk keletre vannak képviselve.

Alkaloidjai között egyszerű aromás és heterociklusos típusok mint a quinolin, isoquinolin, berberin, aporhin, protopin (thalictrin) parvin típusú alkaloidák fordulnak elő.

A szerzők a monográfiában ismertetik a *Thalictrum* genusben előforduló alkaloida struktúráját, molekulatömegét, fiziko-kémiai tulajdonságait, némelyeknek még az izolálását és szerkezet kutatását is. Ahol lehetséges, kiterjed az ismertetés a fiziológiai hatás és felhasználás területére is.

Az első részt az alkaloidák táblázatos összefoglalása zárja le és azon alkaloidoknak a felsorolása, melyeknek az izolálása már megtörtént, de a szerkezeti struktúrájuk még ismeretlen.

A második részben a szerzők a tömeg-, mágneses rezonancia-, infravörös, és ultrabolya spektrumokat írják le, és az adatokból vonják le az egyes szerkezeti tulajdonságokat, míg a negyedik részben az alkaloidák optikai aktivitása alapján számos vegyülettel ORD módszerrel méri a vegyületek COTTON effektusát, és így számos vegyület stereokémiai adatait is szolgáltatják.

A monográfia a speciális alkaloid és gyógyszerkutatókon túl általános szerves-kémikusokat és növényfiziológusokat és érdekelhet. A tanulmány szép iskolapéldáját mutatja a sok oldalú vizsgálatoknak és különböző módon nyert adatok felhasználásának, összeillesztésének a szerkezet kutatásban.

[Dr. Fazekas Sándor

Paul A. M. Dirac: The Development of Quantum Theory. J. Robert Oppenheimer Memorial Prize Acceptance Speech, Gordon and Breach, New York, 1971

Amit ez a remek kis könyv ad, nem az, amit — valószínűleg — a cím alapján várnánk. Nem a kvantumelmélet fejlődésének rendszeres tárgyalását kapjuk; mennyiségileg kevesebbet annál, s mégis — minőségben — mérhetetlenül többet. Amint kövek sokaságából rakott tekintélyes építménynél jóval többet érhet csak egy kis darab kő is, ha az *drágakő*.

Az előszó szól a J. Robert Oppenheimer-emlékdíj megalapításáról, mellyel a miami egyetem teoretikus centruma *Robert Oppenheimer*, a centrum tudományos tanácsának egykori tagja emlékének kívánt hódolni.

A díjat évente a matematika, a fizika, a kémia, a biológia, a tudománytörténet és tudományfilozófia területén elért kiemelkedő eredményekért ítélik oda.

Az első kitüntetett: *Paul A. M. Dirac*, kinek személye így különleges fényt kölcsönöz a díjnak. Bevezetőben *B. Kursunoglu*, a miami teoretikus centrum igazgatója méltatja *Dirac*ot, a nagy embert és nagy tudóst. Elsősorban a nem-fizikus olvasókhhoz szólva vázolja *Dirac* életútját, tudományos felismeréseinek súlyát.

Dirac a díj átvételekor elmondott beszédében mindenekelőtt *Oppenheimer* emlékét idézi. Majd így folytatja: „Általánosságban szeretnék Önökhöz szólni tudományos munkámról; azt hiszem; egy ilyen alkalomkor teljesen mellőznöm kell a szakszerű részleteket. Így előadásomban más utat választok: megpróbálok képet adni Önöknek arról, hogy mit érez a kutató, amikor nyomon van, s azt reméli, fontos eredményt érhet el, mely mély hatással lesz a fizika fejlődésére. Azt gondolhatnánk, hogy a jó kutató ilyenkor teljes higgadtsággal, szenvedélymentesen és tökéletesen logikus elmével mérlegeli a helyzetet, s ha valamilyen gondolata támad, azt alapvetően racionális módon fejleszti tovább. Távolról sem ez a helyzet! A kutató is csak ember, s ha reményei nagyok, nagyok a félelmei is. (Úgy vélem, nem is lehetnek nagy reményeink anélkül, hogy egyszersmind nagy félelmeink is ne vol-

* Virnanc félék.

nának.) Ennek folytán azután cselekvésének folyama nagyon is zavart. Képtelen arra, hogy figyel-mét a gondolatmenet helyes, logikus fonalára összpontosítsa. Ezzel kapcsolatban főként saját tapasztalatokról fogok beszélni, azonban más fizikusokkal — köztük igen kiemelkedőkkel — folytatott beszélgetések alapján úgy vélem, hogy amit mondani akarok, mint meglehetősen általános szabályt el lehet fogadni, mely a fizikai elmélet alapjaival foglalkozó minden kutatóra érvényes.”

Majd Lorentzről szól, s Einstein merészségéről, mellyel a hiányzó kicsiny, de nagyon nehéz lépést megtette, amely a tér és idő relativitásának kimondásához vezetett. Beszél Heisenberg gondolatáról, mely szerint az elméletet a kísérletek szolgáltatja mennyiségekből kiindulva kell felépíteni, s a saját, ehhez kapcsolódó munkájáról, melynek központi kérdése az volt, hogy miképp módosítja a közönséges dinamikát a nem-kommutativitás. Említi Schrödinger esetét, kit a kísérlettel való egyezés hiánya visszatartott attól, hogy egyenletét, mely később Klein és Gordon neve alatt vált ismertté, publikálja. Majd a saját elektronegyenletének felfedezéséhez vezető fejlődést tekinti át, s a pozitron elméletének sorsát — Oppenheimer és Weyl hozzájárulását kiemelve — egészen az Andersomnak és Blackettnek köszönhető kísérleti igazolásig. Nem vállalkozhatunk arra, hogy akárcsak kísérletet tegyünk is e feszültséggel teli könyvecske hitelesen élményszerű atmoszférájának érzékeltetésére; ez bizonyosan lehetetlen lenne. Elolvasását a legmelegebben ajánljuk a természettudomány minden művelőjének, legelső sorban természetesen a kvantumelmélet terén dolgozóknak, s mindazoknak — különösen a fiataloknak —, kiket az intellektuális alkotótevékenység természete érdekel.

Idézzük végül a könyv befejező sorait: „Azt a néhány éves időszakot, mely 1925-tel kezdődött, a fizika Aranykorának nevezhetjük. Alapvető elgondolásaink igen gyorsan fejlődtek akkortájt, s tennivaló volt mindenki számára bőven. Azóta az ebben az Aranykorban született eszmék korlátai is láthatókká váltak már, s valamennyien azt reméljük: beköszönt majd egy új Aranykor, melyet egy igen merész új gondolat indít majd el, a gyors fejlődés egy új korszaka, tele nagy reményekkel és félelmekkel.”

Gy. G.

Deme Sándor: Félvezető detektorok magsugárzás mérésére. Akadémiai Kiadó, 1971. Budapest

Deme Sándor könyvét bizonyára sokan ismerősnek találják, hiszen 1968-ban azonos címen már megjelent az Új Technika sorozatban. Most angol nyelven találkozhatunk vele, lényegesen szebb külsőbe öltöztetve, az Akadémiai Kiadó gondozásában. Mindemellett nem céltalan ismételt felhívni a figyelmet erre a könyvre, hiszen tárgya, a félvezető detektorok, előnyösebb tulajdonságaik révén — pl. jobb energiafelbontásuk — egyre inkább kiszorítják elődeiket (GM-cső, szcintillációs számláló stb.) a használatból.

A félvezető detektorok felhasználási területe igen sokrétű. A legfontosabbak talán a magspektroszkópia, az izotóptechnika és a sugárzás védelem. Ebből az is következik, hogy a könyv nem egy szűk rétegnek szól, hanem fizikusoknak, mérnököknek, radiológusoknak és más szakembereknek, akiknek munkájuk során szükségük van vagy lesz félvezető detektorok felhasználására. A szerző a széles körű felhasználás lehetőségét azzal teremtette meg, hogy könyvét — mint azt az előszóban meg is jegyzi — középszinten írta meg, így az a kevésbé szakember által is könnyen követhető.

A könyv felépítése igen logikus. Az első három fejezet a szükséges elméletet tartalmazza. Az első a magsugárzás és az anyag kölcsönhatásait elemzi. A második a félvezetők fizikájába nyújt rövid bepillantást. A harmadik pedig a homogén és a záróréteges detektorokra, valamint ezek főbb jellemzőit tárgyalja. A negyedik fejezet a detektorok előállításával foglalkozik, míg az ötödik és az olvasó számára nyilván legfontosabb az alkalmazási lehetőségeket veszi sorra. Itt feltétlenül meg kell emlékezni azokról a IV. és V. fejezet végén található igen hasznos táblázatokról, amelyek áttekintést adnak a különböző típusú detektorok jellemző paramétereiről, azonnal felsorolva az illető detektorfajta előnyeit, hátrányait és alkalmazási területeit is.

A könyv VI. és egyben utolsó fejezete Csákány Antal kiváló munkája. Ebben a félvezető detektorokhoz csatlakozó elektronikus berendezéseket ismerhetjük meg.

Balogh Ádám

Paul L. Butzer Rof J. Nessel: Fourier Analysis and Approximation. Vol 1, One-dimensional Theory. Birkhäuser Verlag. Basel und Stuttgart. 1971

1965-ben Oberwolfachban tartott Harmonikus analízis és integráltranszformációk témájú konferencián vetették fel egy olyan könyvnek a szükségletét, amely paralel tárgyalja a Fourier-sorokat és transzformációkat, mégpedig az utóbbi szempontjából, illetőleg, amely a Fourier-transz-

MAGYAR
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
KÖNYVTÁRA

817 B

formációkat nem csupán $p=1$ és $p=2$ esetekben az ${}^P(LR^n)$ -térben tárgyalja. E könyvnek ezenkívül tartalmaznia kellett teljes pontossággal a parciális differenciálegyenletek klasszikus megoldásait, illetőleg a konvolúciós típusú szinguláris integrálok elméletét, alkalmazását. Az approximációs elméletre, beleértve a telítési és a sokszorozási elméletet, a Hilbert-transzformáció, a Riesz-féle frakcionális integrált, a Bessel-potenciálokat, a Fourier-transzformáció módszereit a lokálisan kompakt csoportok esetén. Az ismertetett könyv a fenti célokat kívánja elérni. Jelen, első kötete nem megy túl az egydimenziós elméleten. A második kötet feladata lenne az előzőket tovább építeni. E kötetnek közel fele a Fourier-sorok és integrálok elméletével foglalkozik, mégpedig a kívánságoknak megfelelően az utóbbi szemszögéből. Ez a párhuzamos tárgyalás az abszolút harmonikus analízis könnyű megértéséhez vezet. Ennek érdekében az alapokat képező klasszikus elmélet olyan formában kerül feldolgozásra, amely megnyitja az utat a tetszőleges, lokálisan kompakt Abel-csoportok esetének tárgyalása előtt. Ez már a második kötet feladata lesz. E kötet második fele a konvolúcióval foglalkozik. Így azután az approximációs elméleti rész vezető motívuma a konvolúciós integrálok elmélete, a függvények „simítása” és az approximáció megfelelő mértékének tanulmányozása. Ily módon áttekintni nem csupán a klasszikus elmélet sok területét, hanem szignifikáns új eredményekhez is jut, így pl. a Fourier-sorok összegezési folyamataihoz, a konjugált függvényekhez, frakcionális integráláshoz és differenciáláshoz, a parciális differenciálegyenletek megoldásának korlátaihoz és a telítődési elméletéhez.

Ez a könyv nem adja meg a Fourier-sorok vagy integrálok teljességét, sem mint olyat a klasszikus approximációs elméletét. Ilyen tekintetben ez a könyv az előbbiekkal részletesen, teljességben foglalkozó könyvek bevezetése csupán, hangsúlyozottan alapokat lerakó, elveket egységesítő, és kulminál a telítési elméletben a konvolúciós integrálok esetére.

Egyébként közel 550 problémát tárgyal meg — sok közülük több részből áll — a meglehetősen rutinszerű alkalmazástól a könyv tartalmán túlmutatóan. A nehezebbek közül egyeseknél utal vagy hivatkozik a megfelelő irodalomra. A probléma megoldását azután gyakran felhasználja a következő fejezetekben. Minden egyes fejezet történelmi vonatkozások és a fejezet tartalmát kiegészítő, vagy ezzel kapcsolatos speciális eredményekkel foglalkozó dolgozatok vagy könyvek ismertetésével végződik. (T. Gy.)

Madelung: Festkörpertheorie I.
Springer Verlag. Berlin—Heidelberg—New York 1972.

A szerző feladatát abban látja, hogy az elemi gerjesztések fogalmának szisztematikusan bevezetésével a szilárdtestfizika nagy részét egységes nézőpontból összefoglalja. Ez a koncepció lehetővé teszi sok, szilárdtestben végbemenő folyamat szemléletes formulázását és lényegesen megkönnyíti szerinte azok megértését.

Elemi gerjesztés alatt a szerző a rácsdinamikába szereplő normál rezgésekhez rendelt kvantumokat, a fononokat, elektromágneses tér esetében a fotonokat, egyes kvázi-részecskéket, mint az egy-nemű töltött részecskék alkotta „gázon” áthaladó „saját felhőjét magával hurcoló” töltött részecskéket, a fémek valenciaelektronjainak kollektív gerjesztésekor szereplő rácsrezgés-kvantumokat, a plazmonokat, a rácsatomok spinrendszerének tárgyalásakor a spinhullámokhoz rendelt magnonokat érti.

A most ismertetett első kötetben a szerző megfogalmazza a problémákat, megvizsgálja, mely közelítések lehetségesek és célszerűek, és ilyen közelítések vagy részproblémára való felbontás keretében az elemi gerjesztéseket hogyan célszerű definiálni. A tárgyalás a kölcsönhatásmentes elektrongáz legegyszerűbb modelljéből indul ki, és utána pótlólag egy sor kölcsönhatást vesz tekintetbe. Így jut el a különböző kvázi-részecskék és kollektív gerjesztések definíciójához, mint a kvázielektronokhoz és plazmonokhoz, majd a kristályelektronokon át a fononokhoz, ill. magnonokhoz. Ezután ismerteti a félvezetőkben és a szigetelőkben fellépő elemi gerjesztéseket, az excitonokat.

(T. Gy.)

MAGYAR
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
KÖNYVTÁRA

Technikai szerkesztő: Turchányi György
A kiadásért felel az Akadémiai Kiadó igazgatója — Műszaki szerkesztő: Helle Mária
A kézirat beérkezett: 1972. VI. 16. — Terjedelem: 6,6 (A/5) iv
72-2844 — Szegedi Nyomda

A MAGYAR
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
MATEMATIKAI ÉS FIZIKAI TUDOMÁNYOK
OSZTÁLYÁNAK
KÖZLEMÉNYEI

Matematikai, fizikai, csillagászati dolgozatokat, referátumokat, könyvismertetéseket, a Tudományos Minősítő Bizottságnak a III. Osztályra vonatkozó híreit s a III. Osztály híreit közli. Évenként egy kötet (kb. 40 ív) jelenik meg (négy szám alkot egy kötetet).

A Közlemények előfizetési ára kötetenként, azaz évenként 60 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, Budapest V., Alkotmány u. 21. Pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11488, külföldi megrendelések a „Kultúra”

Könyv- és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat,
Budapest I., Fő utca 32.

(Pénzforgalmi jelzőszám: 218-10990 útján eszközölhetők.)

TARTALOMJEGYZÉK

	oldal
<i>Siklós Tivadar</i> : Az anharmonikus kristályok self-consistens elmélete. II.	527

KÜLFÖLDI PUBLIKÁCIÓK

MTA Lumineszcencia és Félvezető Tanszéki Kutató Csoport 1971	597
--	-----

KÖNYVISMERTETÉSEK

Hyperfine Interactions in Excited Nuclei (K. L.)	598
Recent Developments in the Chemistry of Natural Carbon Compounds. IV. (Fazekas Sándor)	598
P. A. M. Dirac: The Developments of Quantum Theory (Gy. G.)	599
Deme Sándor: Félvezető detektorok magsugárzás mérésére (Balogh Ádám)	600
P. L. Butzer—R. J. Nessel: Fourier Analysis and Approximation (T. Gy.)	600
Madelung: Festkörpertheorie I. (T. Gy.)	601

SZENNYEZÉS KÖRÜLI TÖLTÉSSÚRÚSÉG OSZCILLÁCIÓ ASZIMPTOTIKUS VISELKEDÉSE RÉZ ALAPÚ HÍG ÖTVÖZETEK BEN*

TOMPA KÁLMÁN

MTA, Központi Fizikai Kutató Intézet, Budapest

TARTALOM

	Oldal
I. Bevezetés	2
II. Az MMR módszer elvi alapjai	3
A) A mag elektrosztatikus kölcsönhatása környezetével	3
b) Kvadrupól kölcsönhatás	4
b) Kvadrupól perturbált MMR spektrum nagy mágneses térben	4
B) Mágneses kölcsönhatás	7
III. Szennyezés okozta perturbációk	9
A) Töltéssűrűség-oszcilláció nem-átmeneti fém szennyezések esetén	9
a) Izotróp modell. Friedel-féle összegszabály	9
b) A modell további kiterjesztése	10
B) Átmeneti fém szennyezés nem-átmeneti fém mátrixban	12
a) Töltéssűrűség-oszcilláció nem-mágneses virtuálisan kötött állapotban	14
b) Töltéssűrűség-oszcilláció lokalizált mágneses momentum esetén	15
C) Mérhető mennyiségek	15
a) A MMR spektrumból meghatározható mennyiségek	16
b) Szennyezési ellenállás	18
c) Szennyezések kölcsönhatása	19
D) Fáziseltolódások meghatározási módszerei	19
a) Elméleti módszerek	19
b) Félempirikus módszerek	20
IV. Irodalmi eredmények és következmények	24
A) Irodalmi eredmények	24
a) Egyéb mérések	24
b) Kvadrupóleffektus-mérések	26
B) Irodalmi eredmények összefoglalása, következmények	28
a) Összefoglalás	28
b) Következtetések	28
c) A disszertáció konkrét célkitűzése	28
V. Mérés rugalmasan deformált kockatextúrás réz fólián	29
A) Irodalmi eredmények	29
B) Saját eredmények	30
a) A kísérlet és eredménye	30
b) Térgradiens a rugalmasan deformált köbös fémrácsban	30
c) A mérések kiértékelése	32

* Doktori értekezés. Megvédve 1971. november

VI. Mérési eredmények híg ötvözetekben	33
A) Modellanyagok	34
a) A modellanyagok kiválasztása	34
b) Anyagminták készítése és jellemzőik	34
B) Mérési eredmények	35
a) Három tipikus mérési eredmény	37
b) Nem-átmeneti fém szennyezést tartalmazó híg ötvözetek	37
c) Átmeneti fém szennyezést tartalmazó híg ötvözetek	42
VII. Értékelés, következtetések	46
A) Értékelési módszerek	47
a) All-or-nothing modell	48
b) Sagalyn és mtsai módszere	48
B) Mérési eredmények kiértékelése	50
a) Nem átmeneti fém szennyezést tartalmazó híg ötvözetek	51
b) Átmeneti fém szennyezést tartalmazó híg ötvözetek	51
c) Egy metallográfiai következmény	56
C) Összefoglalás, következtetések	56
VIII. Hogyan tovább? Új kísérletek	57
Függelék	59
Köszönetnyilvánítás	60
IRODALOM	60

Bevezetés

Vizsgálataink célja: rendezetlen réz alapú híg ötvözetek elektronszerkezetének a jobb megértése.

A vizsgálati módszer: a mátrixmagok mag mágneses rezonancia (MMR) spektroszkópiája (pontosabban a ^{63}Cu magok és a szennyezés hatására létrejövő nem köbös szimmetriájú környezet közti elsőrendű kvadrupól kölcsönhatás vizsgálata MMR módszerrel).

A mért fizikai mennyiség: az elektromos tér gradiense, illetve a térgradienssel arányos vezetési elektronsűrűség-oszcilláció a szennyezés körül.

A vizsgálatok célkitűzésével kapcsolatban a bevezetésben egyetlen kérdést vetünk fel:

A kapott információ a konkrét híg ötvözetekre vonatkozó adatokon túlmenően jelent-e valami mélyebb, általánosabb megismerést?

Igen, mert,

a) a tiszta fém (mátrix: M) a bevitt szennyezés (szennyezés X) hatására létrejövő perturbáció megismerése a perturbálatlan rendszer, tehát a fém elektronszerkezetének a jobb megértését is elősegíti;

b) triviális módon a híg ötvözetek elektronszerkezetének a felderítésére az első lépcsőt jelenti a megismerésnek a fémből az ötvözet felé vezető útján;

c) átmeneti fém szennyezést tartalmazó, nem mágneses mátrixú híg ötvözetek a mágneses fémek olyan megvalósítható modelljei, melyekben a „lokalizált momentum” születése, viselkedése és azok kölcsönhatása külön-külön tanulmányozható.

A MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT XIX. KÖTETÉNEK TARTALOMOJEGYZÉKE

<i>Farkas Győző, Kiss Gábor és Ritvay Miklósné:</i> Rubinlaser mode-locking üzemmódjának megvalósítása és a kapott nagyintenzitású pikoszekundumos impulzusok időtartamának mérése	1
<i>Krasznovszky Sándor, Pintér György és Telbisz Ferenc:</i> Spin-paritás meghatározás multipólus momentumok segítségével	13
<i>Kertész Iván:</i> Ultrarövid laser-impulzusok	31
<i>Lendvai Ödön:</i> Kristályfelületek és diszlokációk tanulmányozása maratással	43
<i>Menyhárd Nóra:</i> Erős csatolású és anizotróp szupravezetők mikroszkópikus elmélete a kritikus hőmérséklet közelében, mágneses tér jelenlétében	105
<i>Lovas István:</i> Rezonancia-jelenségek a magreakciókban	209
<i>Ketskemény István, Kozma László, Farkas Éva, Rácz Béla:</i> Eljárás igen gyengén abszorbeáló és fényszóró közegek spektrofotometriai vizsgálatára	315
<i>Raics Péter és Daróczy Sándor:</i> Tapasztalatok Ge (Li) γ -spektrumok simításával kapcsolatban	327
<i>Pardaviné Horváth Márta:</i> Nagynyomások és hatásuk egyes anyagok mágneses tulajdonságaira	343
<i>Pócsik György:</i> A Wightman-elmélet általánosításai, nempolinomiális Lagrange függvények. V.	399
<i>Kemény Péter:</i> A radioaktív felezési idő megváltoztatása kémiai, illetve fizikai behatásokkal	483
<i>Turchányi György:</i> Adatok fizikai, illetve fizikával kapcsolatos kutatásokkal foglalkozó hazai intézményekre vonatkozóan	495

A SZILÁRDTESTFIZIKA FEJLŐDÉSÉNEK VÁRHATÓ IRÁNYAI

<i>Beleznay Ferenc:</i> Fém-félvezető átalakulás jelensége és időszerű problémái	411
<i>Mezei Ferenc:</i> Ion-implantált szennyezések szilárdtestekben	419
<i>Pál Lénárd és Zimmer György:</i> Mágneses anyagok fizikájának időszerű kérdései	427
<i>Prohászka János:</i> A fémek mechanikai tulajdonságainak várható fejlődése	435
<i>Stefán Mihály:</i> Néhány iparilag fontos színesfém fizikájának időszerű kérdései	451
<i>Szép Iván:</i> Az áramkör-integrálás elveinek és módszereinek fejlődési irányai	465
<i>Szigeti György és Bodó Zsolt:</i> A félvezető kutatás néhány perspektivikus kérdése	473

A KLASSZIKUS IRODALOMBÓL

<i>B. L. van der Waerden:</i> Folytonossági tételek félig egyszerű Lie-csoportokra	87
<i>P. Güttinger és W. Pauli:</i> A Li^+ hiperfinomszerkezetéről	93
<i>Wigner Jenő:</i> Bizonyos véges csoportok ábrázolásairól	159
<i>Wigner Jenő:</i> A mátrixokról, amelyek egyszerűen reducibilis csoportok ábrázolásainak Kronecker-szorzatát kiredukálják	165
<i>J. Schwinger:</i> Az impulzuszóráról	267
<i>V. Barmann:</i> A forgáscsoport ábrázolásairól	365

KÖNYVISMERTETÉS

<i>R. Klötzler</i> : Mehrdimensionale Variationsrechnung. Birkhauser Verlag 1970. (T. Gy.)	30
<i>B. M. Gugelj</i> : Luminofori dlja elektrovakuumnoj promislenosti. Energia kiadó 1967. (Szigeti György és Sviszt Pál)	158
<i>P. L. Butzer and B. Sz. Nagy</i> (Editors): Abstract Spaces and Approximation. Proceedings of the Conference held at the Mathematical Research Institute at Oberwolfach, Black Forest, July 18—27, 1968. Edited by (Gy. G.)	364
<i>Christofer Cronström</i> (Editor): Topics in Theoretical Physics, Editor. Proceedings of the Liperi Summer School in Theoretical Physics 1967. (Gy. G.)	364
<i>Dan Olof Riska</i> (Editor): Topics in Theoretical Physics, Proceedings of the Liperi Summer School in Theoretical Physics 1968. (Gy. G.)	360

A IUPAP HÍREI

Az 1971-es konferenciák jegyzéke	103
Az 1972-es IUPAP konferenciák	556

KÜLFÖLDI PUBLIKÁCIÓK

MTA Akusztikai Kutató Csoport	361
BME Fizikai Kémiai Tanszék	361
MTA Lumineszcencia és Félvezető Tanszéki Kutató Csoport	362
MTA Műszaki Fizikai Kutató Intézet	362

A MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT XIX. KÖTETÉNEK NÉVMUTATÓJA

<i>Bargmann V.</i> : A forgáscsoport ábrázolásairól	365
<i>Beleznyai Ferenc</i> : Fém-félvezető átalakulás jelensége és időszerű problémái	411
<i>Bodó Zsolt</i> lásd <i>Szigeti</i>	473
<i>Daróczy Sándor</i> lásd <i>Raics</i>	327
<i>Farkas Éva</i> lásd <i>Ketskémty</i>	315
<i>Farkas Győző, Kiss Gábor és Ritvay Miklósné</i> : Rubinlaser mode-locking üzemmódjának megvalósítása és a kapott nagyintenzitású pikoszekundumos impulzusok időtartamának mérése	1
<i>Güttinger P. és Pauli W.</i> : A Li^+ hiperfinomszerkezetéről	93
<i>Kemény Péter</i> : A radioaktív felezési idő megváltoztatása kémiai, illetve fizikai behatásokkal	483
<i>Kertész Iván</i> : Ultrarövid laser-impulzusok:	31
<i>Ketskémty István, Kozma László, Farkas Éva, Rácz Béla</i> : Eljárás igen gyengén abszorbeáló és fényszóró közegek spektrofotometriai vizsgálatára	315
<i>Kiss Gábor</i> lásd <i>Farkas Győző</i>	1
<i>Kozma László</i> lásd <i>Ketskémty</i>	315
<i>Krasznovszky Sándor, Pintér György és Telbisz Ferenc</i> : Spin-paritás meghatározás multipólus momentumok segítségével	13
<i>Lendvai Ödön</i> : Kristályfelületek és diszlokációk tanulmányozása maratással	43
<i>Lovas István</i> : Rezonancia-jelenségek a magreakciókban	209
<i>Menyhárd Nóra</i> : Erős csatolású és anizotróp szupravezetők mikroszkópikus elmélete a kritikus hőmérséklet közelében, mágneses tér jelenlétében	105
<i>Nezei Ferenc</i> : Ion-implantált szennyezések szilárdtestekben	419
<i>Pardaviné Horváth Márta</i> : Nagynyomások és hatásuk egyes anyagok mágneses tulajdonságaira	343
<i>Pauli W.</i> lásd <i>Güttinger</i>	93
<i>Pál Lénárd és Zimmer György</i> : Mágneses anyagok fizikájának időszerű kérdései	427
<i>Pintér György</i> lásd <i>Krasznovszky</i>	13
<i>Pócsik György</i> : A Wightman-elmélet általánosításai, nempolinomixális Lagrange függvények, V.	399
<i>Prohászka János</i> : A fémek mechanikai tulajdonságainak várható fejlődése	435
<i>Raics Péter és Daróczy Sándor</i> : Tapasztalatok $Ge(Li)$ γ -spektrumok simításával kapcsolatban	327
<i>Ritvay Miklósné</i> lásd <i>Farkas Győző</i>	1
<i>Schwinger J.</i> : Az impulzusmomentumról	267
<i>Stefán Mihály</i> : Néhány iparilag fontos szénfém fizikájának időszerű kérdései	451
<i>Szép Iván</i> : Az áramkör-integrálás elveinek és módszereinek fejlődési irányai	465
<i>Szigeti György és Bodó Zsolt</i> : A félvezető kutatás néhány perspektivikus kérdése	473
<i>Telbisz Ferenc</i> lásd <i>Krasznovszky</i>	13
<i>Turchányi György</i> : Adatok fizikai, illetve fizikával kapcsolatos kutatásokkal foglalkozó hazai intézményekre vonatkozóan	495
<i>Waerden B. L. van der</i> : Folytonossági tételek félig egyszerű Lie-csoportokra	87
<i>Wigner Jenő</i> : Bizonyos véges csoportok ábrázolásairól	159
<i>Wigner Jenő</i> : A mátrixokról, amelyek egyszerűen reducibilis csoportok ábrázolásainak Krockecker-szorzatát kiredukálják	165
<i>Zimmer György</i> lásd <i>Pál</i>	427

